次世代融合研究システム (スーパーコンピュータ) 利用研究成果報告書

第二十六巻 (2022年4月~2023年3月)

2023年10月 東北大学流体科学研究所 未来流体情報創造センター



TOHOKU UNIVERSITY

次世代融合研究システム (スーパーコンピュータ) 利用研究成果報告書

第二十六卷

(2022年4月~2023年3月)

2023年10月

東北大学流体科学研究所 未来流体情報創造センター

はじめに

本報告書は、東北大学流体科学研究所未来流体情報創造センター(Advanced Fluid Information Research Center: AFI)に平成 30 年 8 月に「次世代融合研究システム(AFI-NITY)」として導入された分散/共有メモリ型並列計算機システム FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4 を利用して得られた令和4年4月から令和5年3月までの研究成果を取りまとめたものです。

流体科学研究所は、平成 22 年度に共同利用・共同研究拠点として文部科学省に認定され、平 成 28 年度および令和 4 年度には同拠点「流体科学国際研究教育拠点」として認定更新を受け、 国内外研究機関との共同研究を推進しております. 令和 4 年 10 月、附属未到エネルギー研究セ ンターを改組し、新たに附属統合流動科学国際研究教育センターが発足いたしました. その結果 本所は、流動創成研究部門、複雑流動研究部門、ナノ流動研究部門の 3 研究部門と、附属統合流 動科学国際研究教育センターと附属リヨンセンターの下に、31 の研究分野を持つ研究所となり ました. 流動創成研究部門は、新たな流動機能の創成に関する研究を、複雑流動研究部門は、複 雑な流動現象の解明に関する研究を、ナノ流動研究部門は、ナノスケールの流動現象の解明に関 する研究を推進して参ります. 新しい附属統合流動科学国際研究教育センターでは、流体科学研 究の確固たる学術基盤を元に、具体的な応用分野における社会課題解決にまでつなげる、流体・ 材料連携研究を実施して参ります. これまでリヨンセンターの活動を通じて築いた、フランス・ リヨン大学群との流体・材料連携研究を系統的に拡大して参ります. 令和 3 年の VISION2030 改 訂にあわせて発足した、環境・エネルギー、ナノ・マイクロ、健康・福祉・医療、宇宙航空と、 社会課題解決クラスターの5 つと共に、研究成果の社会課題解決への適用を図って参ります.

平成2年のスーパーコンピュータ導入以来,平成11年の所内措置による未来流体情報創造センター設置を経て,平成17年11月本センターに次世代融合研究システムが導入されました.さらに平成23年5月,平成30年8月の更新を経て,さまざまな時空間スケールの複雑な未知の流動現象の解明,人類社会の持続的発展を実現するための革新的な設計法や制御法の開発を目指して,物質の流れに限らない幅広い「流れ」を対象とした大規模数値解析,実験と計算の融合研究,それらの高度可視化を対象とした流体情報研究が,本システムを利用して推進されております.本センターでは、システムの管理を計画的かつ効率的に行い、各種所内プロジェクト研究、学内外との共同研究を,限られた資源を効率的に活用し推進しております.

本センターを利用して得られる膨大な流体情報を世界に発信すべく,平成 13 年には本研究所 主催で第 1 回高度流体情報国際会議(International Symposium on Advanced Fluid Information: AFI)を蔵王にて開催しました.その後,第 2回(平成 14年:東京),第 3回(平成 15年:ニュ ーヨーク),第 4回(平成 16年:仙台),第 5回(平成 17年:仙台,JAXAと共催),第 6回(平 成 18年:調布,JAXAと共催)と継続され,平成 19年からは流体融合研究センターが主催する TFI 国際シンポジウムとの共催シンポジウムとして第 7回 AFI/TFI-2007から第 12回 AFI/TFI-2012 まで毎年仙台で開催,国際的に高い評価をいただいております.融合センターの活動終了 に伴い,平成 25年より単独シンポジウムとして,第 13回 AFI-2013から第 22回 AFI-2022まで仙 台(2020~2022はオンライン)で開催され,本年 11月には,第 23回 AFI-2023が開催されます.

流体科学研究所は、今後も本センターの大規模数値計算資源を駆使した研究を強力に展開して いく予定です.皆様の一層の御支援、御鞭撻をお願い申し上げます.

令和5年10月

東北大学流体科学研究所未来流体情報創造センターセンター長丸田 薫

i

SP01APR21

統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体工学の研究



目的最適化における実行可能解の分布と最終的に得られた最適機体形状

スパコンの並列計算機能を活用し,実用的な多数制約条件の元で進化計算による共通主 翼・尾翼形状を有するファミリー機の多目的最適化を実施し,その結果,それぞれの消費燃 料を最小化するような航空機の機体形状を求めた.

SP02APR21

データ駆動型流体解析・設計アプローチの研究



物理情報に基づくニューラルネットワーク(PINNs)による高速翼型空力特性評価

支配方程式(Navier-Stokes 方程式)に基づき教師なし学習をすることで, 翼型周りの 流れ場を再現することができた.

CP01APR22

数値流体力学解析と細胞実験による血管疾患の機序解明



左心室内の血流の数値流体解析: (a) 3 つの異なるモデル A, B1 および B2 の大動脈弁の 開口形状, (b)時間平均壁せん断応力 (TAWSS)の分布, (c) 心尖から見た血流停滞指標 (RRT)の分布

大動脈弁の形状によって、弁周囲の TAWSS や心尖部での RRT 分布に変化がみられる.

CP03APR22

プラズマ―生体界面における電荷,電界および活性種挙動の大規模数値解析



重畳電界による平均力ポテンシャルの変化

重畳電界により平均力ポテンシャルの平衡性が変化した.電界による活性種の透過性が 制御できる可能性を示した.

CP05APR22

直交格子による超音速/極超音速下における熱流束予測



超音速流れにおける等温壁と断熱壁による圧力分布の相違

くさび型に対する超音速流れの解析を実施し、境界埋め込み法により等温壁条件を課す ことで、断熱壁と比較して衝撃波角の相違が確認できる.

CP12APR22

乱流渦の速度構造と渦線バンドル束形成のトポロジー解析



渦領域における渦流構造と渦線バンドル束

swirlity φ で示された渦領域におけるある旋回平面上の渦流 v と渦軸バンドル東.旋回平面は半径方向成分の渦伸長効果 S_r のコンター,また渦線バンドル東は曲率 κ のコンターにてそれぞれ示す.(η : Kolmogorov 長さ)

CP15APR22

表面修飾ナノ粒子/分散媒のナノスケール界面現象に関する研究



種々の修飾鎖および溶媒における界面近傍のスナップショット

炭素数の異なる修飾鎖および溶媒に対して界面近傍の分子の挙動をシミュレーション し、修飾鎖層への溶媒の浸透の様子をナノスケールで可視化した.

CP16APR22

回転二重円すい間に発生するテイラー渦の安定性と乱流遷移



分岐後の時間発展解の構造

同心二重円筒間の非定常解の構造.速度の絶対の等値面.周方向の撹乱成分モードは1となっている.

CP18APR22

テントデザイン最適化のためのチャンバー内流れ解析



平行平板チャンバー内におけるワイヤー近傍の壁せん断応力分布

先行研究のCFDモデル(上図)から実際の装置に形状を近づけCFD解析を行うことで(下図),より複雑な壁せん断応力分布を再現した.流入口近傍(四角1)およびワイヤー周辺(四角2)において,顕著な壁せん断応力変化が観察される.

CL04APR22

弾性体の流体起因自励振動を利用したクリーンエネルギー発電技術の研究



流速の違いによる一様流中の PVDF の振動変位の違い

実験でも確かめられた,流速による一様流中の PVDF のふるまい(振動)の様子の違いを 数値シミュレーションで再現したもの.流速の上昇により三次元性が現れることが再現で きている.

CL06APR22





平均濃度勾配を伴う格子乱流場における Scale-by-scale for scalar (SBSS)方程式の 各項の収支

非線形輸送項(IIc)が上流域(x/d=10,15)の二点間距離 r が大きな領域で負の値を取る,す なわち逆カスケードのような挙動を示す.

CL19APR22

固液界面における濡れ現象の分子動力学的解析と解明に関する研究



熱力学積分による固液界面自由エネルギーの算出:(左)固体結晶面と Lennard-Jones 液体,(右)OH 修飾されたシリカ表面と水

固液界面を等温で準静的に引き剥がす過程を分子動力学法で実現することにより、様々 な系について固液界面エネルギーを求めることができる. CL20APR22





ノッキング実験と 2D DNS の比較

実験のシュリーレン画像(a)と 2D DNS の密度勾配の結果(b)と実験と 2D DNS の dP/dt の時刻歴.

CL21APR22

45 3.5 ♦ Exp.
O Hold (Nakamura)
× Extinction (Nakamura) 40 3 02 volume fraction / % 35 2.5 30 **E** 2 4 25 1.5 8 20 1 Х 0.5 15 0 -2 0 2 4 6 8 10 -1.5 -1 -0.5 0 r / cm 0.5 1 1.5 2 Rim thickness / mm 2000 Non-premixed flame 10^{1} Ìт NH3 10^{0} 1800 H2O 02 NH3 02/N2 10^{-1} 1600 10⁻² 1400 ì Mass fraction Temperature 02/N2 NH3 10 1200 10^{-4} 1000 10^{-5} Z 800 10-6 600 10 400 NH $10^{-8} \frac{1}{0.0}$ 0.2 0.4 0.8 1.0 1.2 1.4 0.6 r/cm 02/N2 NH3

アンモニア非予混合バーナー火炎における保炎消炎機構の解明

燃焼 CFD によるアンモニアバーナー火炎の保炎消炎境界の予測

詳細反応機構を用いた燃焼CFDによって実験で観測された保炎消炎境界を非常に良い精度で再現した.温度や化学種分布からリム壁背後で形成される再循環領域内の反応進行の 重要性を示した.

CL22APR22



熱的に誘起されたクヌッセン力による物体の非接触制御に関する研究

非接触で物体を引きつける

図は圧力分布と流れ場を表している.高温の薄い板を物体に近づけることにより,熱尖端 流の効果で物体周りに低圧が生まれ,板の位置により,左右の側面に働く圧力に差が生じ, 物体を板に引き付ける力が働く.

CL32APR22

埋め込み境界法を応用した数値流体解析の高度応用



粒子中心を通る x-z 断面における瞬時圧力分布

無次元時刻 t*=5.8 における気体の5倍の密度の2つの粒子中央断面の瞬間圧力分布.破線は粒子の初期位置を表す.上の図は初期配置における2粒子間の距離が粒子直径の1.5倍の条件で,下は2.5倍の場合の図を表す[Ref.1].

CL33APR22

原形質流動における Brown 運動の 2D 及び 3D シミュレーション



植物細胞断面における流れ場(速度と圧力)のスナップショット

赤い円錐の向きと大きさが速度ベクトルの向きと大きさに対応する. 断面上部(下部)で は手前(向こう側)に向かって流れている. 圧力はカラーコード(右側)に示す色で表示さ れている. 揺動力の大きさ D が大きくなると速度ベクトルの向きも Brown 運動の影響を受 けることが分かる.

CL35APR22

次世代液化燃料の噴射過程に関する研究



2次元ノズルにおけるアンモニア噴射時の気相体積率

アンモニア噴射時のノズル内流れを既存のキャビテーションモデルを適用して計算した. 過剰な相変化が生じているように見受けられ,今後の検討が必要である.

CL01JUN22

脳血管画像に基づく流れ場推定手法の開発



深層学習による CFD 初期流れ場の推定

CFD の初期流れ場として深層学習による流れ場を用いることで、繰り返し計算の残差変化が安定化し、繰り返し回数が低減した.算出した流れ場は既存 CFD 手法と同等であった.

CL01OCT22

20 Flame radius [mm] 15 10 $\phi = 1.0$ - 1g simulation mesh 1.0 5 $-\mu g$ simulation mesh 1.0 -μg – 1g #5 Ŧ 0 0 10 20 30 40 50 60 Time [ms]

数値シミュレーションによるアンモニア球状火炎伝播特性の解明

通常重力および微小重力条件下における当量比 1.0 のアンモニア/空気燃焼の球状伝播火炎 半径の時間変化

通常重力下においては、伝播火炎半径の数値シミュレーション結果は実験計測値の変化 と概ね一致したが、微小重力下においては、実験計測値の変化を捉えられなかった.

GR01APR21





波形粗さ要素によって生成される横流れ渦列

波形の凹凸と渦列がほぼ同期している中央の図では渦列を維持できるが,同期していない上下の図では渦列が崩壊して乱流が発生する.

GR04APR21

固気液接触線でのマルチスケール性を考慮した相変化熱流体解析



ミクロ液膜形成を考慮した核沸騰現象の数値シミュレーション

固体面からの加熱により急速の膨張する蒸気気泡の底部に液膜が形成される様子.数μm の厚みであり,高い熱伝達を有する液膜である.

GR06APR21

炭化水素系アイオノマー内部の物質輸送特性の解明



酸素透過のシミュレーションに関する計算結果

構築された計算系を用いて、炭化水素系高分子アイオノマーSPP-BP において、シミュレ ーションを行った.

GR01SEP21

先端車輌基盤技術研究におけるスーパーコンピューティング



Keyhole 形成と温度分布に関する数値解析結果

初期サンプルを青,最適化結果のパレート解を橙で示す.最適化の結果,異径ピンフィンの最適な形状が見つかった.

GR01OCT21

粗視化分子動力学法における触媒層構造生成プロセスの解析



アイオノマー膜形成プロセスを再現する分子システム

Nafion アイオノマー溶液が乾燥過程中に Pt/C 基板上に膜を形成する様子を示す.計算 系の上部領域から一定の時間ごとに一定数の溶媒分子を除去することで,蒸発シミュレー ションを行った.

GR01NOV21

ナフィオン膜における機械的特性と影響要因の解明



応力負荷・除荷サイクルの応力-ひずみ曲線

材料に対して応力負荷・除荷サイクルの試験を行った.負荷・除荷曲線は互いに一致しな かった(ヒステリシス現象).

GR03APR22

温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いたガソリン代替合成燃料・電解液溶媒・アン モニアの着火・燃焼特性に関する研究



N₂O/Ar, N₂O/CO₂/Ar, N₂O/H₂O/Ar 混合気の熱分解における N₂O モル分率の実験及び数値 計算結果の比較

N₂O の熱分解において,第三体が Ar のみの条件, CO₂ 添加条件, H₂O 添加条件の実験 を行い,実験結果を基に CO₂, H₂O の三体係数を新たに定義した.新たに定義した三体係 数を用いた数値計算結果は実験結果をよく再現している. GR04APR22

SI エンジンの高効率化に向けた異種燃料添加による燃焼促進効果の調査



よどみ点に置かれた Flame ball を初期解としたときの,火炎挙動の伸長率依存性. 規格化温度 0.75 の等温面を示す.

伸長率に応じて平面火炎が形成される場合(伸長率, a = 1.0 s-1),計算領域内で消炎する場合(a = 0.6, 3.0 s-1)が観察された.

GR06APR22

圧縮性流れ高精度数値解法による空力騒音低減の数値シミュレーション研究



多孔質材を貼り付けた円柱まわり流れ

空力音低減のために多孔質材を貼り付けた円柱まわりの流れを渦度分布により可視化したもの.

GR07APR22

機械学習による乱流モデルの開発と乱流制御の数値シミュレーション研究



らせん渦の切りつなぎ

らせん渦の一部が別の部分と切りつなぎを起こしている様子を渦度の大きさの等値面で 示したものである.

GR08APR22

固体電解質/コート材界面のLiイオン輸送に関する分子論的解析



固体電解質・コート材界面構造モデル

固体電解質 Li6PS5Cl(110)とコート材 LiNbO3(100)表面で構造した界面構造モデル.界 面形成エネルギーは約 13.5 meV/Å2 である.同構造で界面構造対応する NNP を作成し, 大規模 MD シミュレーション計算を実行する予定. GR01JUN22

固体高分子形燃料電池長寿命化に向けたセリウムイオン輸送モデルの構築とセリウムイオ ン分布シミュレータの開発



高分子電解質膜内部におけるセリウムイオン輸送現象シミュレーションの計算系

分子動力学法を用いて高分子(緑),水分子,ヒドロニウムイオンの酸素(赤),水分子, ヒドロニウムイオンの水素(白)Ceイオン(黄)で構成された高分子電解質膜内における 輸送現象の解析を行った. YG01APR21

ガスジェット浮遊法による溶融体の物性計測高度化に向けたマルチフィジックスデータ同 化解析



浮遊する溶融金属球

高温(1391K)で溶融する金属の溶融体を剛体球としてモデル化し,安定浮遊時の流れ場 を可視化した.
FS01APR21

流れ中の微生物挙動の予測と制御



微生物集団が作るアクティブ流体ジェットの不安定性

微生物集団が作るアクティブ流体ジェットは、始めは中央の図のように円柱状の形状で あっても、pullerタイプの微生物では左図のように液滴へと分裂する.一方、pusherタイ プの微生物では右図のように波打った形状へと変化する.

FS01APR22

航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究



教師なし学習を用いた LES 瞬時場の超解像 ($Re_{\tau} = 1000$ のチャネル乱流)

y⁺ = 15における粗格子 LES の主流速度瞬時場(左)を超解像した結果(中央)を表している.

FS01AUG22

大規模疎行列の通信隠蔽反復法の検討



Suite Sparse Matrix コレクションのテストマトリックにおける Pipelined BiCGSafe 法の 収束性

提案した p-BiCGSafe 法の収束過程は、従来の BiCGStab または p-BiCGStab 法と比較 して滑らかになっていることがわかる.

次世代融合研究システムの構成

2018 年 8 月に稼働を開始した現在の「次世代融合研究システム (AFI-NITY*1)」は、スーパーコンピュ ーティングを行う計算サーバー群、計算結果の画像解析のための 3 次元可視化サーバー、実験装置を接 続して計算シミュレーションと実験解析をリンクする計測融合研究のための次世代融合インタフェース サーバーを中核として、PB クラスの容量をもつストレージシステム(磁気ディスク装置)を有し、3 次元 可視化出力装置を備えたリアライゼーションワークスペース (RWS) や周辺機器を備えています。計算サ ーバー群は、分散メモリ型並列計算システムとして FUJITSU、共有メモリ型並列計算システムとして vSMP による、理論演算性能合計 3. 7PFLOPS・主記憶容量合計 192TB(最大共有メモリ 16TB)の計算機能を提供 します。サーバー群と利用者をつなぐネットワークは40Gbit Ethernet をバックボーンとして整備され、 研究所内において高速なデータ交換や画像処理を含むクライアント作業を可能にしています。



*1) 未来流体情報創造センター(AFI Research Center)では、次世代融合研究システムのニックネーム を "AFI-NITY"としました。AFI-NITYはAFI Next-generation Integrated supercomputer for promoting fluid science and TechnologYの略称であり、次世代の流動科学技術を押し上げるスーパーコンピュー ティングシステムであることを意図しています。また、AFI-NITYは親和・融和を意味する英単語 "affinity"に由来しており、流体科学の基礎研究と先端学術領域との融合、学際融合的な流体科学研 究の推進、社会的課題の解決を通じた社会との親和を目指しています。

未来流体情報創造センターの組織



次世代融合研究システムの利用形態

次世代融合研究システムは、以下に示す[プロジェクト研究],[非プロジェクト研究]により運用されています.

[プロジェクト研究]

次世代融合研究システムの主要な利用形態であり、以下の種別により構成される.

- **計画研究** 重点的に推進するプロジェクト
- **公募共同研究** 流体科学研究所の公募共同研究に採択された課題に基づくプロ ジェクト

共同研究 民間企業等を含む流体科学研究所外の研究者との共同研究プロ ジェクト

- 一般研究 通常のプロジェクト
- **若手研究** 流体科学研究所所属の准教授,講師,助教が代表者となる若手研 究者奨励のためのプロジェクト
- **連携研究** 受託研究または共同研究の契約に基づき,計算費用として外部資金を受け入れて成果を外部組織に提供するプロジェクト
- **特定研究** 学内他部局の教員が代表者となって,流体科学に特化した研究を 行うプロジェクト

[非プロジェクト研究]

将来,プロジェクト研究へ移行するための準備研究を行う.

次 世 代 融 合 研 究 シ ス テ ム 利 用 研 究 成 果 報 告 書 (スーパーコンピュータ利用研究成果報告書)

第二十六卷

(2022年4月~2023年3月)

目 次

I. 研究成果概要

- <プロジェクト種別>
 - # 課題番号 プロジェクト課題名

研究代表者氏名 頁

<計画研究>

- 1 SP01APR21
 統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体工学の研究

 大林 茂
 教授

<公募共同研究>

 4 CP03APR22
 プラズマ―生体界面における電荷, 電界および活性種挙動の大規模数値 解析

- 佐藤 岳彦 教授 …………33
- 5 CP05APR22 直交格子による超音速/極超音速下における熱流束予測
 下山 幸治 准教授 …………36

7	CP13APR22	複雑地下構造内の流体流動シミュレーションによる地下構造の逆解析
		鈴木 杏奈 准教授43
8	CP14APR22	Direct numerical simulation of high Rayleigh number natural
		convection
		小宮 敦樹 教授
0		志元修飾ナノ粒ス/八数雄のナノスケール周五祖色に開ナス研究
9	UF 19AF N22	
10	CP16APR22	回転二重円すい間に発生するテイラー渦の安定性と乱流遷移
		小宮 敦樹 教授
11	CP17APR22	ふく射熱遮蔽機能を有する消防装置の開発
		岡島 淳之介 准教授62
12	CP18APR22	ステントデザイン最適化のためのチャンバー内流れ解析
		女四 晔 助教
13	CP25APR22	物理駆動機械学習を用いた有機材料の構造物性相関の解明
10	01 20111 1122	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
14	CP31APR22	実気象条件下におけるソニックブーム評価関数の開発
		大林 茂 教授
15	CP34APR22	高速電離流を伴う宇宙航行システムの数値的研究
		永井 大樹 教授
10		
16	CP02JUN22	回転回軸二里円同型 MHD エイルキー変換装直内の 3 次元電磁流体解析
		同示 万臣 教汉
17	CP03JUN22	Dual-Phase 固体酸化物電解質膜内の粒界と酸素イオン伝導特性の相関
_ •		関係の解明
		徳増 崇 教授83

18	CL02APR22	対称反射壁を用いたクアッドロータ機の地面効果の評価 永井 大樹 教授86
19	CL04APR22	弾性体の流体起因自励振動を利用したクリーンエネルギー発電技術の研究 永井 大樹 教授89
20	CL06APR22	非普遍的な乱流場における乱流エネルギ・スカラ輸送機構に関する基礎 研究
		服部 裕司 教授
21	CL09APR22	液体・ソフトマター・界面の分子熱輸送 小原 拓 教授98
22	CL10APR22	飛行する回転中空円筒の実験と数値解析の発展 石本 淳 教授102
23	CL11APR22	鏃を装着したアーチェリー競技用ベアシャフトを過ぎる流れの数値解析 服部 裕司 教授105
24	CL19APR22	固液界面における濡れ現象の分子動力学的解析と解明 Surblys Donatas 助教107
25	CL20APR22	燃焼振動の解明に向けた直接数値計算による火炎と非線形音響の相互作 用の調査
		森井 雄飛 助教
26	CL21APR22	アンモニア非予混合バーナー火炎における保炎消炎機構の解明 中村 寿 准教授114
27	CL22APR22	熱的に誘起されたクヌッセン力による物体の非接触制御に関する研究
		小原 拓 教授121
28	CL23APR22	熱遷移流に対する大規模分子動力学解析 菊川 豪太 准教授127

29	CL24APR22	分子動力学シミュレーションに。	よる界面	面ナノバフ	ブルの応力	」と安定性の解明
			菊川	豪太	准教授	129
30	CL26APR22	パッシブな外部駆動力因子を有	した自タ	然対流境界	早層中の不	下安定成長の解明
			小宮	敦樹	教授	131
31	CL27APR22	相分離構造を有する高分子材料	のマル	チスケー	ル数値解	析
			菊川	豪太	准教授	134
32	CL28APR22	液体ロケットインデューサで生 に関する三次元数値解析	じるキ	ャビテー	ション不	安定現象の抑制
			伊賀	由佳	教授	137
33	CL30APR22	既存空港を利用した那覇空港を 車両の LES 解析	拠点と	した際の	離島や都	市部を結ぶ飛行
			大林	茂	教授	140
34	CL32APR22	埋め込み境界法を応用した数値	流体解	析の高度	応用	
			大林	茂	教授	146
35	CL33APR22	原形質流動における Brown 運	動の 2 1	D及び3I)シミュ	レーション
			内一	哲哉	教授	148
36	CL35APR22	次世代液化燃料の噴射過程に関	する研	究		
			大島	逸平	助教	153
37	CL01MAY22	太陽電池性能向上に向けた未結 学的解析	合手終	端機構お	よび結晶	構造の分子動力
			徳増	崇	教授	156
38	CL01JUN22	脳血管画像に基づく流れ場推定	手法の	開発		
			安西	眸	助教	159
39	CL04JUN22	壁面近傍における液滴流動機構				
			大島	逸平	助教	162

xliv

40	CL01JUL22	慣性移動を伴う懸濁液流れの実	系劾粘度	評価に向	けた数値	ンミュレーション
			船本	健一	准教授	165
				6		
41	CL01OCT22	数値シミュレーションによる	アンモニ	ニア球状外	、炎伝播特	性の解明
			中村	寿	准教授	168
<→砕ね	开					
42	GR01APR21	境界層遷移のモデル構築とそれ	れに基づ	ういた層流	記化デバイ	スの設計
			廣田	真	准教授	170
43	GR03APR21	有機分子修飾界面におけるナ	ノスケー	ール界面現	見象の解明]
			菊川	豪太	准教授	174
44	GR04APR21	固気液接触線でのマルチスケ	ール性を	考慮した	相変化熱	、流体解析
			阿局	停之升	唯教授	176
45	GR05APR21	化学気相堆積法および原子層	维積法に	こおける成	え長機構の)量子論的/分子動
		力学的解析		. , _,,		
			徳増	崇	教授	178
46	GR06APR21	炭化水素系アイオノマー内部の	の物質輔	俞送特性0	解明	
			徳増	崇	教授	182
4 17	CD01CED01	生地市転甘ぬ社径研究にわけ	7 7	°. –) / L	• . = ,	ヽノガ
47	GR01SEP21	元 ^{「 一 一} 甲 一 本 通 本 通 か 一 か に か り ・	コスー/ 石木	、ーコン に	.ユーナイ 教授	
			́Ц/ Т	1-] -	4717	100
48	GR01OCT21	粗視化分子動力学法における	触媒層構	毒造生成 フ	パロセスの	解析
			徳増	崇	教授	188
49	GR01NOV21	ナフィオン膜における機械的	寺性の景	《響要因の	解明	
			徳増	崇	教授	190
F 0		ゴーマルナルビニッロ水田ナ-	ヒナフィ	, , , , 、	У., , <u>1</u> 4 4	枢神陸印ランシン
50	GRUIAPK22	フュノルヤヤビアイ保炎器を	月りるノ	シフムン	′エツト恞	無除焼कにわけ
		シルトグロエルビックガギヴコ	早川	晃弘	准教授	193

x1v

51	GR02APR22	ガスタービンおよび工業炉バー 関する研究	ーナに対	抗した気	液アンモ	ーニア噴流燃焼に
			小林	秀昭	教授	197
52	GR03APR22	温度分布制御型マイクロフロ- 電解液溶媒・アンモニアの着	ーリアク k・燃烤	▼タを用い E特性に関	ト たガソリ する研究	ン代替合成燃料・
			中村	寿	准教授	201
53	GR04APR22	SI エンジンの高効率化に向け	た異種炊 森井	然料添加\3 雄飛	こよる燃焼 助教	接促進効果の調査 207
54	GR05APR22	らせん渦の不安定化過程の直接	妾数値シ	/ミュレー	ション研	究
			服部	裕司	教授	
55	GR06APR22	圧縮性流れ高精度数値解法に。 研究	よる空力	」騒音低減	の数値シ	ミュレーション
			服部	裕司	教授	215
56	GR07APR22	機械学習による乱流モデルの開	発と乱] 服部	流制御の数 裕司	数値シミコ 教授	- レーション研究 219
57	GR08APR22	固体電解質/コート材界面の	Li イオ 徳増	ン輸送に 崇	関する分 ⁻ 教授	子論的解析 226
58	GR01MAY22	相変態をともなう鉄内部の電気	湯による 徳増	5炭素拡散 崇	(に関する 教授	分子論的解析 228
59	GR01JUN22	固体高分子形燃料電池長寿命(築とセリウムイオン分布シミ:	とに向け ュレータ	^け たセリウ の開発	ムイオン	輸送モデルの構
			徳増	崇	教授	231
<若手研	究>					
60	YG01APR21	ガスジェット浮遊法による溶剤	融体の物	物性計測高	高度化に向	同けたマルチフィ
		マンンハノ ク回行し時代	阿部	圭晃	助教	234

<連携研究>

- - 62 FS01APR21 流れ中の微生物挙動の予測と制御 航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究 63 FS01APR22 河合 宗司 教授246 64 FS02APR22 複合材料の破壊に関するマルチスケール数値解析 FS03APR22 高強度レーザー照射グラフェンにおける異常イオン加速機構の解明 65 多様体論的アプローチによる能動的流体制御手法に関する大規模数値解析 66 FS04APR22

 - 68 FS010C122 気象前側に向けた入規模自由度場の再現とアクラュエータ位直の取過化 アルゴリズムの研究

I.研究成果概要

計画研究

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	SP01APR21
研究種別	計画研究
利用期間	$2021.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年2月28日提出

統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体工学の研究

大林 茂,焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 教授,助教

吉村 僚一, 高見 光, 森田 聖大

野本 京佑, 奥野 陽子, 小佐田 一, 長橋 昌平, 大久保 裕汰, 濱田 真伍

森 悠二, 西山 晶, 庭野 翔也, 木田 樹

Schitte Nhelm Patrick

東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻

宗 巨樹, 川端 敦仁

東北大学工学部 機械 · 知能航空学科

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

本研究は,統計的かつ力学的な計算モデルによる航空宇宙流体工学の研究と題して, 最新のデータ科学に基づく統計モデルに,剥離や乱流遷移など流体の非線形現象に関 連する力学モデルを組み合わせることで,従来の空力予測技術を精度と計算速度にお いて飛躍的に向上させ,航空宇宙流体工学のブレークスルーを目指すものである.本 研究室ではこれまで,直接数値計算による詳細な流れ場の解析と,さらに多様な風洞 実験も実施してきた.そして,いずれの長所も短所も熟知した上で,それらを駆使し た新しい融合計算技術を提案,航空機が実際に飛行する際に重要な流体力学の諸問題 の解決に取り組んで来た.

これまでに、航空機翼前縁部の直接数値計算を実施し、世界最高レベルの高レイノ ルズ数域で実際に発生する不安定な波の発生を捉えることができており、航空機開発 において注目を集めつつある.風洞実験では、世界最大の磁力支持天秤装置を用いて 低アスペクト比円柱の空力特性を得られており、さらに実験条件と同等のレイノルズ 数域での高精度数値計算により、流体力学的な新発見も得られている.データ同化手 法に関しては、企業との共同研究を行い、可観測性に基づく最適計測地点探索や、燃 焼場への適用など、これまでにないデータ同化の可能性を広げる成果を出している. 航空安全については、上空の晴天乱気流、そして離発着時に問題となる空港の風環境 について、それぞれ気象モデルや implicit LES を用いた解析を進めている.

今後,数値計算において特に乱流の非線形作用など現象の詳細に着目しつつ,デジ タルツインの実現による工学設計技術の革新を期待できると考えている.

1.2 研究期間内の最終目標

高解像度で計算領域を十分に確保した大規模並列化による複雑流れの直接数値計算を 軸として、データ同化技術のさらなる高精度化を進める.特に流体の非線形性、散逸性に 着目し、その物理的性質を明らかにするとともに、安定性解析、データ同化など、従来の さまざまな解析に取り入れ高度化する.それにより、革新的な航空機設計技術を獲得する ことを最終目標とする.

安定性解析においては、時空間情報を排除しない全体安定性解析(または大域的安定性解 析、英語では Global stability analysis)を、より高精度な予測、流体現象の解明に用い、その 有用性を確立する.データ同化では、本研究室で MSBS を用いて取得した実際の PIV デー タや、前年度に取得した implicit LES 計算結果をもとに、JAXA において開発中の新しい乱 流モデルに適用し、非定常性などより複雑な現象への予測精度向上を達成する.そのほか、 航空機の安全航行に資する研究では、晴天乱気流の高精度予測、回避方法の提案、さらに 空港周辺の風環境の予測を可能とする LES 技術の構築を進める.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 研究項目について

本プロジェクトでは、多岐にわたる研究項目を実施している. 今年度の成果として、以下の 研究項目について報告する.

- ▶ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究
 - 後退翼前縁部境界層の遷移に関する研究 (焼野, 森)
 - 壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析 (焼野, 濵田)
- ▶ 航空機の安全航行に関する研究
 - 晴天乱気流の発生機構に関する研究(吉村)
- ▶ データ同化に関する研究
 - MSBS 実験取得 PIV へのデータ同化 (野本,川端)
 - 風洞実験支援のための計算(森,宗,木田)
- ▶ そのほかの研究
 - 亜音速ジェット騒音発生機構に関する研究(森田)
 - 超音速水素旅客機の形状最適化に関する研究 (大久保)
 - BLIファンを搭載した電動航空機の形状最適化に関する研究(長橋)

2.2 具体的な成果の説明

- ▶ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究
 - 後退翼前縁部境界層の遷移に関する研究

航空機後退翼の,層流化技術の開発のため,後退翼面上で特に問題となる乱流遷移に関す る大規模並列計算による直接数値計算を実施している.これまでに,壁面粗さを模擬した人 工擾乱を前縁付近に付与することで,風洞実験では捉えることが難しかった,進行波の発生 を再現することに成功し,さらにエネルギー過渡増幅との比較により,遷移機構は従来の漸 近安定性ではなく,エネルギー過渡増幅により説明されるべきであることを示した (Yakeno and Obayashi, *Physics of Fluids* 2021).

昨年度は、前縁部境界層の受容性について検討を進めるため、壁面粗さに加えて、主流乱 れの影響に関する検討も実施した. 圧縮性 NS 方程式の計算ソルバーの線形化にも取り組み 達成した. NS 方程式と LNS 方程式の差として、非線形成分を抽出することで、遷移のもと になると考えられる非線形成分は、主に進行波周辺で発生していることが明らかになった. さらに、主流乱れを模擬した人工擾乱として、周波数帯域の異なる二種類を用意し、受容す る秩序構造を比較した.まず主流乱れによっては、発生する不安定波は、定在波よりも進行 波の強度が強い傾向が観察された.次に周波数帯域の違いでは、低周波帯域のものに対して は、より低周波の進行波が、高周波帯域のものに対しては、より高周波の進行波がそれぞれ 発生することがわかった.高周波の進行波は、前縁部から後流域にかけての大きな構造を形 成する.人工擾乱として壁面粗さを与えた場合と比較しても、構造は前縁から後流域にかけ て大規模になる特徴があることが新たにわかった.従来、世界的には、安定性解析や直接数 値計算は、計算コストの制限から一部の領域に対してのみの解析を実施するにとどまってい る.しかしながら、本計算結果より、それでは全容を捉えきれていない可能性があることが 判明した (Mori et al. 投稿準備中).

今年度は、計算の範囲をより後流に広げた計算の準備を進めている (図 1). 今後、更なる 解析を進め、層流翼開発において世界に先んじることを目指す.



▶ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究

壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析 •

従来、滑らかであるとされる粘性底層以下の粗さが、遷移もしくは乱流場へ影響を与える 可能性を指摘されている。本研究プロジェクトでは、直接数値計算を用いて、境界層の4分 の1程度の非常に小さな粗さでも、粗さの波長によっては遷移を遅延する効果を有すること を示してきている (Tameike et al., Journal of Fluid Science and Technology 2020). 一昨年度は, さらに三次元の直接数値計算でもその効果を実証した.

昨年度は、さらに自由度の高い粗さに対する解析を進めるため、直接数値計算ソルバーに 対し,粗さ形状の自由度を許容し,精度を向上させ,さらに計算コストを抑えるために,Volume Penelization Method (VPM) と, 重合格子法 (Overset grid method) を使用するための実装をお こなった. それにより, サンドペーパー面のような複雑な三次元粗さ (Distributed Micro Roughness (DMR), 2022 年 米国特許仮出願)の流れへの影響を,直接数値計算により解析する ことを可能にした.

今年度は、特に、乱流エネルギーバジェ ットなど, 乱流統計量による低抵抗化機構 の解明を進めた.砂状粗面では T-S 波が早 期に崩壊することがわかったが、3成分分 解によって TKE を T-S 周期成分と3次 元成分ごとに調べると、T-S 周期成分 TKE は波状粗面と同様に平滑面よりも抑制され る結果が得られ、なおかつ3次元成分 TKE の値も抑制されていることがわかった.砂 状粗面では様々な波数を持つ速度擾乱が発 生すると考えられ、2次不安定を誘起した ために T-S 波が成長する前に3次元崩壊 が起こり, T-S 波の崩壊に伴う大きな速度 変動擾乱の発生を抑制したために, TKE が 下がったのではないかと考えられる.また, 乱流生成項、乱流の摩擦抵抗への寄与につ



影響解析の様子 (M2 濵田).

いても評価を行い、砂状粗面においては乱流生成が平滑面よりも少なく、せん断による大き な乱流生成を生じる波状粗面とは異なり乱流境界層への有害な影響が少ないと言える (Hamada et al., International Journal of Heat and Fluid Flow 2023 submitted). さらに、ガウス関数 を用いて人工的に砂状粗面を再現し、乱流遷移への影響を調べたところレーザ計測によって 得られた砂状粗面と同様に TKE の抑制効果が得られ, 摩擦係数もほとんど同等の値となり, やはり摩擦抵抗の低減効果があることがわかった (図 2). 今後粗さのパラメータの最適化に より、より高い効果を与えることが期待される.

▶ 航空機の安全航行に関する研究

晴天乱気流の発生機構に関する研究

晴天乱気流に分類される乱気流は、従来のレーダーで感知することが出来ないため遭遇予

測が難しく危険であることが知られている.しかし,従来気象分野では,航空機が航行する 高度域での熱流体現象にはあまり注目されてきておらず,知見が少ない.そこで本研究では, 実際に航空機事故の発生した過去の例を取り上げ,高解像の気象予測モデル WRF により再現 する数値実験を実施した.それにより,気象条件によって Kelvin-Helmholtz (KH) 波を発生し, 航空機の危険な揺動が引き起こされる機構を明らかにした (R. Yoshimura *et al., Journal of Applied Meteorology and Climatology* 2022).また,気象庁の気象モデル asuca を用いたさ らに高解像の計算や,KH 波が崩壊して,航空機の揺動に直接的な影響を与える渦になるま での過程について,全体安定性解析による理論計算も実施してきている.

今年度は、さらに ASUCA で計算した大気場において KH 波が崩壊し、航空機の揺動に直接的な影響を与える渦になるまでの過程について、流体方程式の感度を利用した理論計算も実施した.大気の KH 渦列を基本場として、流体場に加えた擾乱の成長を観察した.その結果、擾乱の成長はその空間周波数に依存しており、波数が高く KH 渦間のひずみによる伸張を受けやすい場合、KH 渦に垂直に向く縦渦に収束した(図3).これらの縦渦の最大成長率を与える最適な波数が存在することも示唆された.これらの縦渦は2次元的なせん断流においてはリブ渦と呼ばれるが、本計算で誘起された縦渦はリブ渦とは異なる渦度の分布を持っていた.これは使用した大気のプロファイルがねじれており、この3次元的な効果が表れたものと考察しているとともに、今後詳しい調査を行う予定である.



▶ データ同化に関する研究

• MSBS 実験取得 PIV へのデータ同化

鈍頭物体の空力特性とその周囲に形成される流れ場の関係を理解することは工学的に重要である.これまで、気流に平行に支持された円柱周りの流れや空力特性について、MSBS

を用いた実験により解析を実施してきている.前年度は実験に加えて,Implicit LES による 大規模数値計算も実施することで,流れの特徴的な周波数成分に関する詳細な知見を取得す ることができた(Kuwata *et al., Physical Review Fluids* 2021).本研究プロジェクトでは, 風洞実験のデジタルツイン構築に向けた取り組みを進めており,特にデータ同化の高度化を 試みている.昨年度は,最もポピュラーな乱流モデルの一つである SA モデル係数の一つに ついて,時間平均化した PIV 可視化結果に近づけるための最適化をおこなった.その結果を 図 7 に示す.データ同化を施した SA モデル係数を用いると,計算結果は PIV 観測結果によ り近づくことが確認された.

今年度は、非定常流れについてのデータ同化を目指した.シミュレーションは、RANS/LES 融合シミュレーションの一種である DES を用いることとし、昨年と同じく DES の方程式中 に存在するパラメータを最適化することによりシミュレーション結果を PIV データに近づけ ることを試みた (図 4).シミュレーション及び PIV データの時間平均場を比較すると、最適 化されたパラメータは流れ場の再現性が良好であるという結果が得られた.高周波数の乱流 成分に関して PIV との差が生じており、さらに改善の余地がある.



風洞実験支援のための計算

後退翼面での横流れ不安定性による遷移現象に対し,孤立粗度 (DRE) による低抵抗化デバ イス (SRE) の性能実証試験を行なっている.図5に示すように,三次元境界層を再現する後 退平板モデル周りの計算を実施し,期待する圧力分布を得るための側壁の設置方法を探索した.

その他,低乱風洞実験棟に新設される吹き出し式風洞と MSBS を接続する風路の設計で,風 洞試験に適した流れの状態 (一様性,乱れ強さなど)を維持できる形状を探索した.図6は風 洞内の流速分布と測定部における主流に垂直な方向の速度ベクトルを示している.





▶ そのほかの研究

本研究プロジェクトでは、そのほかにも、電動航空機の BLI 搭載の最適設計や、超音速水 素航空機の最適設計に関する研究も進めている.

BLIを搭載した旅客機モデルNASA-CRM周り,FaSTAR-Moveを用いた非定常計算結果を 図7に示す.BLIファンを搭載した機体の胴体尾部を自由変形させたモデル100ケースのCD0 (抵抗)及びSFC(燃料消費率)の最適化の結果,まず胴体尾部を膨らませると抵抗低減の傾向 があることと、胴体尾部をへこませるとSFCが改善する傾向があることがわかった.今後 さらに一般的知見の取得のための研究を実施予定である.図8に,超音速水素航空機の航続 距離性能の向上を目指した最適設計の事例を示す.胴体後方部分を伸ばすことで航続距離性 能の評価指針である揚抗比を向上,カナードにより迎角・水平尾翼舵角・カナード舵角の3 変数を同時に扱うことのできる簡単な最適化方法である「最小誘導抵抗モデル」により揚抗 比の向上ができ,コンコルド模擬機体に関しては実機の揚抗比と同等の値を得た.





亜音速ジェット噴流の騒音発生機構の詳細解析も実施している.前年度は動的モード分解 と呼ばれる乱流の複雑な流体構造から周期的な構造を抽出する手法と周波数解析を組み合わ せた手法を開発し、ジェットの中に音響波が初期の乱れに影響を与え、それが繰り返される フィードバック現象があることが示唆された.本年度はジェットによる音響波が乱れにどの ように影響を与えるか定量的に評価するため、シミュレーション上でジェット騒音発生位置 に任意の周波数音波を発生する点音源を再現し、上流の乱れエネルギーの成長率を計算する ことで特定の周波数の音響波に対する流れの感度解析を行った.その結果を図9に示す.こ れを見ると,他のケースよりも初期に大きく乱れるケース (Stp = 0.2) が発見され,乱れのピークの渦度可視化を行ったところ他のケースに比べて初期の乱れによる渦がより上流で起きており (渦度可視化結果における赤い四角で囲まれた領域),ジェットを乱しやすい特定の音響波があることがわかった.



3. 研究目標の達成状況

▶ 層流化など摩擦抵抗低減に関する研究

後退翼前縁部境界層の遷移に関する研究

前年度までに後退翼前縁部周辺10%の計算を実施したが、今年度は50%まで範囲を広げた、 同様の計算条件での直接数値計算を実施することができた.前年度に検討した壁面粗さだけ でなく、今年度はさらに、主流乱れを模擬した人工擾乱の受容性をも確かめることができた. 高レイノルズ数となる運行時に胴体で発達する乱流境界層には、高周波数擾乱が含まれるこ とが予想されるため、高周波擾乱を受容して成長する進行波に対する対策が必須であること が改めて確認された.今後は、マッハ数依存性、確認された不安定モードの成長を抑制する 後退翼の形状最適設計、層流化デバイスの設置に関する検討を進めていく.

• 壁面粗さの遷移または乱流への影響に関する詳細解析

今年度は、境界層厚さの4分の1以下の小さな粗さを解像した直接数値計算を実施するために、当該計算ソルバーに、Volume Penelization Method (VPM) と、重合格子法 (Overset grid method) の実装をおこなった. それにより、サンドペーパー面のような複雑な三次元粗さの流れへの影響を、直接数値計算により解析することが可能になった. 今後は、既存のサンド

ペーパー面だけでなく、これまでの知見をもとに最適化した形状の、遷移や乱流への効果を 確かめていきたいと考えている.

▶ 航空機の安全航行に関する研究

晴天乱気流の発生機構に関する研究

高解像の気象予測モデルWRFと, asuca により, 実際の乱気流の発生を再現する数値実験 を実施した. さらに, 航空機の運動モデルを乱気流場に適用し, 実際に航空機で観測した重 力加速度との比較も行っている. 今後は, KH 波が崩壊していく過程について, 全体安定性 解析による理論計算をさらに進めつつ, 危険領域の事前予測を高精度に行うための知見の取 得を行なっていく.

空港周辺風況予測のための LES 技術開発

これまでに、空港周辺の風況予測のために、既存の圧縮性 NS 方程式の計算ソルバーを改 変し、Implicit LES 計算を可能にした. 今後は、必要に応じて建物周辺の解像度を上げたり、 境界条件に実際の数値予報データを用いたりすることで、より現実に近づけていく. また、 航路上の乱流統計量を取得することで、危険予測領域を明示するなどを検討する.

▶ データ同化に関する研究

MSBS 実験取得 PIV へのデータ同化

これまでに、最もポピュラーな乱流モデルの一つである SA モデル、非定常な流れに対し て DES モデルを最適化し、実験で取得した PIV 観測値の速度分布へ近づけられることを確認 した. 今後は、JAXA による最新の乱流モデルや、PSP 観測値の圧力分布を用いて、非定常 流れに対するデータ同化に挑戦するなどする.

▶ そのほかの研究

これまでに、FaSTAR-Move により BLI 搭載機の旅客機全機周りの計算を可能にし、さら に水素を燃料とする超音速機に関する最適設計指針を得た. 今後は、さらに汎用性の高い多 目的最適化を実施する.

その他, 亜音速ジェット噴流の騒音発生機構の詳細解析では, 今後は感度の高かった周波数 (Stp=0.2) と安定性理論の結果と比較し, 音響波の正体を明らかにすることを試みる.

4. まとめと今後の課題

本研究では、大規模並列非定常数値解析を軸に、これまでデータ同化や遷移の安定性解析であ まり考慮されていなかった、流体の非定常現象の詳細に着目し取り入れることで、工学設計の革 新を目指している.今年度は特に、平板境界層遷移においては、三次元的に分布する砂状の粗さ 面上での、直接数値計算を実施し、乱流統計量の詳細なデータを取得することができた.今後、 粗さ形状の種類を増やし、影響についてさらに解析していく.また、航空機事故の発生した実際 の事例について、気象計算だけでなく、DNS によりさらに詳細な解析を実施し、KH 渦の発生機 構を明らかにした.今後は、さらに高解像計算を実施、そして安定性理論に基づき、航空機揺動 に直接的な影響をもたらす細かな渦の発生に関する研究を深めていく.また、羽田空港周りの実 スケール大規模計算についても、今後は航路上の統計量を取得していく.風洞実験デジタルツイン構築に関しては、今後 JAXA の最新の乱流モデルのデータ同化により、より複雑な流れ場の予測の高精度化に挑戦する.そのほか、電動航空機 BLI や、超音速水素航空機の最適化、亜音速ジェット噴流の騒音発生機構の解明もさらに進めていく.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

2021 年度

- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, Kento Suzuki, Junshi Ito, Ryota Kikuchi, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>: Large Eddy and Flight Simulations of a Clear Air Turbulence Event Over Tokyo on 16 December 2014, Journal of Applied Meteorology and Climatology, 2022
- <u>Aiko Yakeno, Shigeru Obayashi</u>: Propagation of stationary and traveling waves in a leading-edge boundary layer of a swept wing, Physics of Fluids, Vol. 33 (9), pp. 094111, 2021
- <u>Aiko Yakeno</u>: Drag reduction and transient growth of a streak in a spanwise wall-oscillatory turbulent channel flow, Physics of Fluids, Vol. 33 (6), pp. 065122, 2021
- <u>Masahide Kuwata</u>, Yoshiaki Abe, Shota Yokota, Taku Nonomura, Hideo Sawada, <u>Aiko Yakeno</u>, Keisuke Asai, <u>Shigeru Obayashi</u>: Flow characteristics around extremely low fineness-ratio circular cylinders, Physical Review Fluids, Vol. 6 (5), pp. 054704, 2021

- Chiharu Inomata, <u>Masahide Kuwata</u>, Sho Yokota, Yoshiaki Abe, Hideo Sawada, <u>Shigeru Obayashi</u>, Keisuke Asai, Taku Nonomura: Model position sensing method for low fineness ratio models in a magnetic suspension and balance system, Review of Scientific Instruments 94(2) 025102-025102 2023 年 2 月
- Chenguang Lai, Liangkui Tan, <u>Shigeru Obayashi</u>: Aeroacoustic control mechanism on near-wall-wing of Aero-train based on plasma jet, Physics of Fluids 35(2) 025122-025122 2023 年 2 月

- Chenguang Lai, Shengji Zhu, Shuai Feng, Guangtao Zhai, Liangkui Tan, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>: Flow characteristics and wake topology of two-seat convertibles, Physics of Fluids 35(1) 015144-015144 2023 年 1 月
- Kazuya Seo, Hiroyuki Okuizumi, Yasufumi Konishi, Takuto Kobayashi, Hiroaki Hasegawa, <u>Shigeru Obayashi</u>: Measurement of aerodynamic force and moment acting on a javelin using a magnetic suspension and balance system, Scientific reports 13(391) 1-11 2023
- Shun Takahashi, Takayuki Nagata, Yusuke Mizuno, Taku Nonomura, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>: Effect of particle arrangement and density on aerodynamic interference between twin particles interacting with a plane shock wave, Physics of Fluids 34(11) 113301-113301 2022 年 11 月
- <u>焼野 藍子</u>, 流体工学におけるデジタルツイン, 日本機会学会計算力学部門 CMD Newsletter 68(November) 2022 年 11 月
- Keiichi Shirasu, Masayoshi Mizutani, Naoki Takano, Hajime Yoshinaga, Tsuyoshi Oguri, Ken ichi Ogawa, Tomonaga Okabe, <u>Shigeru Obayashi</u>: Lap-shear strength and fracture behavior of CFRP/3D-printed titanium alloy adhesive joint prepared by hot-press-aided co-bonding, International Journal of Adhesion and Adhesives 117 2022 年 9 月
- Hikaru Takami, <u>Shigeru Obayashi</u>: A Formulation of the Industrial Conceptual Design Optimization Problem for Commercial Transport Airplanes, Aerospace 1-21 2022 年 6 月
- Chenguang Lai, Liangkui Tan, Yujie Zhu, Shengji Zhu, <u>Shigeru Obayashi</u>: Aeroacoustic characteristics of multi-directional wing under the wing-in-ground effect, Physics of Fluids 34(6) 067112-067112 2022 年 6 月
- <u>焼野 藍子</u>, 竜門賞受賞記念解説 壁乱流準秩序構造に着目した摩擦抵抗低減制御に関す る研究, 日本流体力学会 ながれ 41 161-166 2022 年 6 月
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, Kento Suzuki, Junshi Ito, Ryota Kikuchi, <u>Aiko Yakeno</u>, and <u>Shigeru Obayashi</u>. Large-eddy and flight simulations of a clear-air turbulence event over Tokyo on 16 December 2014. Journal of Applied Meteorology and Climatology, 61(5):503 – 519, 2022
- 三坂 孝志, 久保 世志, 淺海 典男, 出田 武臣, 大林 茂: フィルム冷却流れ解析を高度

化するデータ同化,日本ガスタービン学会誌 50(3) 163-169 2022 年5月

※ 2022 年度内に投稿済み

- <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>, New fine structure in the transitional boundary layer, (投稿済み)
- <u>Aiko Yakeno, Rin Inamura</u>, Naoki Watanabe, <u>Ryoichi Yoshimura</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>, Naoki Kurimoto, and Scott Skeen: Data assimilation for spray penetration and combustion ignition delay simulation using schlieren image velocimetry, (投稿済み)
- <u>Shingo Hamada</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>: Fine roughness effect on the transition delay using direct numerical simulation</u>, (投稿済み)
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, Junshi Ito, Patrick Schittenhelm, Kento Suzuki, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>, Clear air turbulence resolved by numerical weather prediction model validated by onboard and virtual flight data, (投稿済み)
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Junshi Ito, <u>Shigeru Obayashi</u>, (投稿準備中)

著書

2021 年度

• <u>大林 茂</u>, 三坂 孝志, 加藤 博司, 菊地 亮太 : データ同化流体科学―流動現象のデジタ ルツイン―, 共立出版, 2021 年 1 月発行

国際学会

- <u>Shigeru Obayashi, Aiko Yakeno,</u> Makoto Hirota, Yuki Ide, Naoko Tokugawa and <u>Hikaru Takami</u>: Computational Laminar Flow Technology, 2021 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT), Plenary Speak, November 15th, 2021
- <u>Yuta Inaba</u>, Shugo Date, Hariansyah Muhammad Alfiyandy, Yoshiaki Abe, Koji Shimoyama, Tomonaga Okabe, <u>Shigeru Obayashi</u>: Optimization of Structural Layout for Composite Aircraft Wings, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, OS20-37, October 27th, 2021
- Shingo Hamada, Aiko Yakeno, Sayaka Suzuki, Shigeru Obayashi, Bagus Nugroho:

Transition delay and drag reduction mechanism by designed surface roughness, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, OS21-CRF-47, October 27th, 2021

- <u>Shota Morita</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Mode Decomposition Method for Extracting Characteristic Structures Related to the Subsonic Jet Noise Generation, Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, OS22-12, October 27th, 2021
- <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>: Traveling-wave propagation in the swept leading-edge boundary layer at high Reynolds number, August 22-27, 2021
- <u>Shigeru Obayashi</u>, Takashi Misaka, <u>Aiko Yakeno</u>, Ryota Kikuchi: Data Assimilation for Engineering Design and Operation, 14th International Conference on Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control (EUROGEN2021), Semi-plenary Lecture, June 29th, 2021
- <u>Shota Morita, Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Modal approach for extracting flow structure related to the subsonic jet noise generation, ELyT workshop 2021, June 25th, 2021
- <u>Shigeru Obayashi</u>, Takashi Misaka, <u>Aiko Yakeno</u>, Ryota Kikuchi: Digital-Twin Fluid Engineering, The biennial International Conference on Cybernetics (CYBCONF2021), Plenary Lecture, June 10th, 2021

- N. Takano, Masayoshi Mizutani, K. Shirasu, H. Yoshinaga, T. Oguri, K. Ogawa, T. Okabe, <u>Shigeru Obayashi</u>: Application of metal additive manufacturing to multi-material adhesion with CFRP through porosity control, The International Conference on Leading Edge Manufacturing/Materials & Processing (LEM&P 2023) 2023 年
- Hiroyuki Okuizumi, Rintaro Makino, Hideo Sawada, Yasufumi Konishi, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>, Taku Nonomurav: Measurement of Aerodynamic Characteristics of Square Cylinders with Low Fineness Ratio Using 1-m Magnetic Suspension and Balance System, AIAA SciTech Forum 2023 2023 年 1 月 26 日
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>: Global sensitivity explaining atmospheric shear layer transition</u>, 75th Annual Meeting of the Division of Fluid

Dynamics 2022年11月21日

- <u>Shingo Hamada</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>: DNS Study of Drag Reduction Effect on Ultra-Fine Rough Surfaces, 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics 2022年11月21日
- <u>Shota Morita</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Flow Structure Extraction Related to the Noise Generation in A Subsonic Free Jet by Using Mode Decomposition Methods, ELYT WORKSHOP 2022 2022 年 11 月 16 日
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Benoit Pier, Frederic Alizard, <u>Shigeru Obayashi</u>: Sensitivity Analysis to Investigate the Secondary Structure from Atmospheric Shear Flow, ELYT WORKSHOP 2022 2022 年 11 月 16 日
- <u>Aiko Yakeno, Shingo Hamada, Sayaka Suzuki</u>, Masanari Hattori, Masayoshi Mizutani, Yoshiaki Abe, <u>Shigeru Obayashi</u>: Transition Delay Effect of Ultra-Fine Surface Roughness by Aircraft Paint or Film Processing, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- D. Sasaki, K. Abe, H. Moriai, S. Takahashi, G. Yamada, S. Ogawa, K. Mori, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>, Koji Shimoyama: Study on Heat Flux Prediction Method for Cartesian-Mesh CFD Under Supersonic Flows, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- H. Yamashita, B. Kern, R. Iura, T. Ukai, T. Misaka, <u>Shigeru. Obayashi</u>: Sonic Boom Variation of North Atlantic Supersonic Flight, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- Y. Okada, T. Ishide, H. Izumi, A. Harada, Koji Shimoyama, <u>Shigeru Obayash</u>: Numerical Analysis on the Flow Around a Flapping Wing, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- Patrick Schittenhelm, <u>Ryoichi Yoshimura</u>, Junshi Ito, Shigeru Obayashi: Investigation on Aircraft Turbulence Using Large Eddy and Flight Simulations, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- Shun Takahashi, Takayuki Nagata, Yusuke Mizuno, Taku Nonomura, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>: Influence of Particle Density and Relative Position on Aerodynamic Interference Between Two Moving Particles Driven by Shock-Induced Flows,

Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日

- S. Asakura, H. Hasegawa, <u>Shigeru Obayashi</u>, K. Nakagawa: Improvement of Aerodynamic Performance of Flying Object Clothed with Fabrics of Air Permeability Flows, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- Ssiichiro Morizawa, R. Sakai, Ryota. Kikuchi, <u>Shigeru Obayashi</u>: Development Study on an Air Transportation System with a Roadable Aircraft Among Remote Islands and Major Cities Around Okinawa, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- K. Tanaka, M. Kudo, <u>Shigeru Obayashi</u>: Development of Reduced Order Models for Controlling Unsteady Thermocapillary Convection, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- U. Kagawa, T. Arai, M. Hirano, H. Izumi, T. Ishide, Koji Shimoyama, <u>Shigeru</u> <u>Obayashi</u>: Development of a Small Birdlike High-Performance Flying Robot, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- Chenguang Lai, Liangkui Tan, Yujie Zhu, <u>Shigeru Obayashi</u>: Aeroacoustic Generation and Propagation Characteristics of Annular-Wing Under WIG Effect, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- Kazuya Tajiri, <u>Aiko Yakeno</u>, Shahriar Alam, <u>Shingo Hamada</u>: Study of Shock Wave-Particles Interaction, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022年11月10日
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>, Benoit Pier, Frederic Alizard: Atmospheric aircraft turbulence investigated by sensitivity analysis Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- <u>Shota Morita</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Modal approach for extracting flow structure related to the subsonic jet noise generation, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日

- <u>Aiko Yakeno, Shingo Hamada</u>, Masanari Hattori, Masayoshi Mizutani, Yoshiaki Abe, <u>Shigeru Obayashi</u>: Transition delay effect of ultra-fine surface roughness by aircraft paint or film processing, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 10 日
- <u>Shota Morita</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Modal Approach for Extracting Flow Structure Related to the Subsonic Jet Noise Generation, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 9 日
- Ryuichi Ishiai, Kazuya Seo, Daiya Tsudou, Ryuya Sakaue, Hiroyuki Okuizumi, Yasufumi Konishi, <u>Shigeru Obayashi</u>, Shinichiro Ito, Masaki Hiratsuka: Measurement of Aerodynamic Forces Acting on a Vibrating Javelin, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11 月 9 日
- K. Fuchigami, Hiroyuki Okuizumi, Sho Yokota, <u>Shigeru Obayashi</u>, Taku Nonomura: Effect of Reynolds Number on Critical Geometry of Magnetically Supported Cylinder Body, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) 2022 年 11月9日
- <u>Hajime Kosada</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>: Feasibility Study of Ammonia Fueled Supersonic Transportation, The Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022) 2022 年 10 月 13 日
- <u>Hajime Kosada</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>: Feasibility study of ammonia fuel supersonic transportation, The 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT) 2022 年 10 月 11 日
- <u>Aiko Yakeno</u>: Challenges for delaying transition to reduce airplane drag, US-Japan workshop on bridging fluid mechanics and data science 2022 年 9 月 6 日
- Yoshiaki Abe, <u>Shigeru Obayashi</u>: Digital Transformation of Aircraft Design with Carbon Fiber Reinforced Plastics, 2nd US-Japan Workshop on Data-Driven Fluid Dynamics 2022年9月6日
- <u>Shota Morita</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Flow structure analysis related to the acoustic wave generation in subsonic free jet using dynamic mode decomposition, 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) and 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics

(APCOM-VIII) 2022 年 8 月 2 日

- <u>Shota Morita</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Christophe Bogey, <u>Shigeru Obayashi</u>: Flow Structure Analysis Related to the Acoustic Wave Generation in Subsonic Free Jet Using Dynamic Mode Decomposition, WCCM-APCOM 2022(15th World Congress on Computation Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computation Mechanics) 2022 年 7 月 31 日
- <u>Ryoichi Yoshimura, Aiko Yakeno</u>, Junshi Ito, <u>Shigeru Obayashi</u>: Direct Global Stability of Atmospheric Shear Flow That Causes Aircraft Turbulence, Twelfth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12) 2022 年 7 月 21 日
- <u>Ryoichi Yoshimura</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, Junshi Ito, <u>Shigeru Obayashi</u>,:Direct global stability for atmospheric shear flow inducing aircraft turbulence, 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 2022 年 7 月 19 日
- <u>Shingo Hamada</u>, <u>Aiko Yakeno</u>, <u>Shigeru Obayashi</u>, Ultra-fine roughness effect on transition delay using direct numerical simulation, 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 2022 年 7 月 19 日
- <u>Aiko Yakeno</u>: Direct global sensitivity approach for atmospheric shear flow that causes aircraft turbulence, ELyT workshop, 2022 年 6 月 9 日

国内学会・研究会等

- <u>吉村 僚一</u>, 伊藤純至, 鈴木 健斗, Patrick Antonio Schittenhelm, <u>焼野 藍子</u>, <u>大林 茂</u>:
 冬季の南関東中下層で発生する晴天乱気流の大規模数値シミュレーション及び飛行機の 揺動評価, 第 16 回航空気象研究会, 発表番号 2, 2022 年 2 月 4 日
- <u>吉村 僚一</u>,伊藤 純至,鈴木 健斗, Patrick Antonio Schittenhelm, <u>焼野 藍子</u>, <u>大林 茂</u>:
 2020年12月30日に発生した乱気流事例の asuca による LES 解析およびフライトシミ
 ュレーション,第23回非静力学モデルに関するワークショップ,セッション 3-2,2021
 年10月28-29日
- <u>稲葉 裕太</u>, 伊達 周吾, Hariansyah Muhammad Alfiyandy, 阿部 圭晃, 下山 幸治, 岡部 朋永, <u>大林 茂</u>: 複合材航空機の主翼設計における構造部材配置最適化, 第 53 回流体力学講演会/第 39 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2A04, 2021 年 7

月1日

焼野 藍子, 稲村 麟, 大林 茂, 渡辺 直樹, 栗本 直規, 燃料シミュレーション予測精度
 向上のためのシュリーレン画像を用いたデータ同化適用の研究, 統計数理研究所・東北大
 学流体科学研究所・材料科学高等研究所 合同ワークショップ, 2021 年 4 月 21 日

- <u>飯島 啓伍</u>, <u>大林 茂</u>, <u>小佐田</u> —: アンモニアハイブリッド航空機の概念検討, 日本航空
 宇宙学会北部支部 2023 年講演会 ならびに 第 4 回再使用型宇宙輸送系シンポジウム
 2023 年 3 月 21 日
- <u>大林 茂</u>: 流体とインフォマティクス,日本機械学会流体工学部門企画講習会 2023年2 月1日
- 長橋 昌平, 焼野 藍子, 大林 茂, 筒井 裕貴, 横川 譲: 胴体後部形状の変化による BLI ファン搭載電動ハイブリッド航空機の空力性能評価, 第36回数値流体力学シンポジウム 2022 年 12 月 14 日
- <u>大林 茂</u>: 流動現象のデジタルツインを実現するデータ同化流体科学, アドバンス・シミ ュレーション・セミナー2022 2022 年 12 月 9 日
- <u>大林 茂</u>: フルードインフォマティクス 2.0, 日本機械学会関西支部第 382 回講習会(ネット配信 WebEX) 実務者のための流体解析技術の基礎と応用 2022 年 11 月 24 日
- 焼野 藍子,初鳥 匡成,阿部 圭晃,新屋ひかり:帯電物体の大気へのマルチスケール影響調査,第9回東北大学若手研究者アンサンブルワークショップ 2022 年 11 月 22 日
- <u>大久保 祐汰</u>, <u>焼野 藍子</u>, <u>大林 茂</u>, 湯原 達規, 吉田 憲司: 超音速水素旅客機の燃料タンク配置と空力性能検討, 第 60 回飛行機シンポジウム 2022 年 10 月 12 日
- 香川 詩花,石出 忠輝,新井 太一郎,平野 政輝,泉 源,山崎 渉,下山 幸治,大林 茂, 劉浩:小鳥型高性能飛行ロボットの開発,第60回飛行機シンポジウム 2022年10月11 日
- 新井 太一郎,石出 忠輝,香川 詩花,平野 政輝,泉 源,山崎 渉,下山 幸治,大林 茂, 劉浩:2自由度を有する羽ばたき翼モデルの開発,第60回飛行機シンポジウム 2022 年10月11日
- <u>大林 茂</u>, 野本 京佑, <u>焼野 藍子</u>, 野々村 拓: データ同化による風洞実験デジタルツイン

構築の試み,第 60 回飛行機シンポジウム 2022 年 10 月 11 日

- <u>焼野藍子</u>:壁乱流準秩序構造に着目した摩擦抵抗低減制御に関する研究,日本流体力学 会年会 年会 2022 竜門賞受賞記念講演 2022 年 9 月 27 日
- <u>大林 茂</u>,廣田 真,阿部 圭晃:飛行機のながれ ~航空産業のデジタルとグリーン~,令 和 4 年度みやぎ県民大学 大学開放講座 東北大学流体科学研究所 ながれの科学 2022 年 9 月 2 日
- 野本 京佑,吉村 僚一,<u>焼野 藍子</u>,<u>大林茂</u>:円柱後流の PIV 計測データを用いたデータ
 同化による乱流モデルの高精度化,第 54 回流体力学講演会/第 40 回航空数値シミュレーション技術シンポジウム 2022 年 7 月 1 日
- 井浦 玲伊, 鵜飼 孝博, Hiroshi Yamashita, Bastian Kern, 三坂 孝志, <u>大林 茂</u>: 10 年間の気象データを基にした実フラ イト上におけるソニックブームの伝播解析, 第 54 回流体力学講演会/第 40 回航空数値シミュレーション技術シンポジウム 2022 年 6 月 30 日
- 川俣 柊介,川本 裕樹,奈良 祥太朗,野原 徹雄,高橋 俊,<u>大林 茂</u>:複雑な管形状による多数の個体粒子を含む非ニュートン流体の数値流体解析,第 45 回日本バイオレオロジ 一学会年会 2022年6月

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

特許

2022 年度

• <u>Aiko Yakeno</u>, 米国特許仮出願 (63/389,369), Ultra-fine roughness effect on transition delay using direct numerical simulation

受賞

2021 年度

- <u>焼野 藍子</u>,日本流体力会 2021 年度「竜門賞」受賞,2022 年 2 月 19 日総会で決定
- 大林茂, 2021年度日本機械学会流体工学部門「部門賞」受賞, 2021年11月9日
- <u>濱田 真伍</u>,第25回データ同化夏の学校にて、「優秀発表賞」を受賞、2021年8月13日
- <u>森 悠二</u>, 東北大学工学部「**総長賞**」を受賞, (2022 年 3 月 28 日)

2022 年度

• 焼野 藍子, 2022 年度日本機械学会流体工学部門「フロンティア表彰」受賞, 2022 年

11月13日

- <u>Patrick Schittenhelm</u>, The 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022)「Best Presentation Award」を受賞 (2022 年 11 月 10 日)
- 小佐田一,日本航空宇宙学会北部支部 2022 年講演会並びに第3回再使用型宇宙輸送系シンポジウムで「Good Presentation Award」を受賞(2022 年 4 月 15 日)
- 奥泉 寛之, 令和4年度科学技術分野の文部科学大臣表彰において「研究支援賞」を受賞 (2022年4月15日)

マスコミ発表

- 2021 年 雑誌『子供の科学』(発行部数 9 万部) 2021 年 12 月号(11 月 10 日発売)で、
 旅客機主翼の層流化に関する研究が紹介された
- 2021 年 Physics of Fluids 掲載論文内容を東北大学プレスリリース,日本経済新聞やその他の Web サイトに記事が掲載された
 - ▶ 「世界初!旅客機主翼の流れの遷移メカニズムを解明 −後退翼の層流化により空気 抵抗の大幅減へ前進−」東北大学プレスリリース
 - ▶ 「東北大、旅客機主翼の流れの遷移メカニズムを解明」日本経済新聞
 - 「旅客機主翼の層流から乱流への遷移メカニズムを解明 将来の低計算コストでの航空機開発に寄与 東北大学」 エンジニアのためのキャリア応援マガジン「fabcross for エンジニア powered by MEITEC」
 - ▶ 「東北大,後退角主翼前縁部の乱流遷移メカニズム解明」航空新聞社 jwing.net
- 2021年 Physical Review Fluids 掲載論文が Editor's suggestion に選出され、東北大 学プレスリリース、日本経済新聞、日刊工業新聞などに記事が掲載された
 - ▶ 「短い円柱の空気抵抗は円板に近づく -磁力浮遊させる風洞実験により超細長比円 柱の空力特性を解明-」東北大学プレスリリース
 - 「東北大、磁力浮遊させる風洞実験により超低細長比円柱の空力特性を解明」日本 経済新聞
 - ▶ 「東北大、風洞実験で超低細長比円柱の空力特性解明に成功」航空新聞社 jwing.net
 - ▶ 「東北大、磁力浮遊で空力計測 宇宙カプセル設計高度化」日刊工業新聞

書式 (1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	SP02APR21
研究種別	計画研究
利用期間	$2021.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年2月28日提出

データ駆動型流体解析・設計アプローチの研究

下山 幸治¹, Timothy Jim², 鎌田 大³,

足立 匠海³, 中谷 直輝³, Muhammad Alfiyandy Hariansyah³,

明石 朱里³, 関西 一平³, 飯島 諒³, 藤本 雄登³

1東北大学流体科学研究所 准教授,2学術研究員,3大学院生

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

流体力学の数値解析(CFD)は発展の一歩を辿ってきており、昨今の計算機性能の向上と 相まって精度的にもコスト的にも有益なツールとして認識されるようになった.本プロジェ クトでは、CFD技術およびそれを用いた流体設計の更なる高度化を目指して、既存のCFD 技術と最先端のデータ科学技術の融合により、独自のデータ駆動型アプローチの開発し、流 体研スパコンシステムを駆使して様々な実問題への応用に役立てる.CFD技術単体をモノづ くりに応用した従来の研究は、計算コストおよび精度の面で不十分であり、実用的ではなか った.一方本研究では、CFD技術とモノづくり問題の間にデータ科学技術を仲介させること で、流体問題の本質を学習・予測できるようにした上で、流体力学に則したモノづくり支援 を高効率かつ高信頼性で実現することを目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

本プロジェクトは、「最適化」「不確かさ解析」「データ同化」に関連した課題に取り組む. それぞれの課題に共通して要求されるタスクは、必要最小限の解析コスト(例えば、CFD 解析のケース数)をもって、解析解・最適解を正しく取得することである.そのためには、 途中過程で解析モデル・最適化モデルを逐次評価し、必要に応じてデータを取捨選択・有効 活用し、解析モデル・最適化モデルを進化的に改良していく、データ駆動型のアプローチを 確立する.アプローチの枠組みはすべての課題でほぼ共通であるが、アプローチの細部につ いては各課題の趣旨に個別対応させることで検証を進める.最終的には、流体力学の実問題 に応用し、その有効性を実証する.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 物理情報に基づくニューラルネットワークによる高速翼型空力特性評価

ナビエ・ストークス方程式を組み込んで学習する物理情報に基づくニューラルネットワーク
(Physics-Informed Neural Networks: PINNs)を用いて翼型周りの流れを学習するとき、学 習コストの大きさのために解を得るまでの計算コストが大きくなってしまう問題がある.本研 究では、ニューラルネットワークの学習コスト低減手法であるファインチューニングを PINNs に適用することで、解の精度を維持しつつ学習コストを低減することができた(図1).



(a) PINNs による流れ場の推定結果



(b) 学習コストの比較



2.2 離着陸時の安定性を考慮したサブオービタル宇宙機の空力設計

サブオービタル宇宙機の離着陸時における空力設計に,空力性能に加え,安定性も考慮する ストレーキ形状を探索することを目的とした.初期サンプルの結果,離着陸時の揚力最大化と トリム性能は両立できたが,一方で巡航時の揚抗比最大化とトリム性能はトレードオフの関係 であることがわかった.また,トリムの制約を満たす設計が少なかったため,空力性能の向上 とトリム制約を両立した設計を今後探索する必要がある(図 2).



図2 離着陸時の安定性を考慮したサブオービタル宇宙機の空力設計

2.3 航空エンジンファン設計の多目的ベイズ最適化

限られたコストで有制約多目的実問題の設計最適化を実現するために、共同研究を通して有 望な最適化手法の性能比較を実施する.そこで、本研究では NASARotor67 をベース形状とし て、優れた多様性を有する解集団の探索が期待される EPBII を用いて多目的ベイズ最適化を行 った.結果として、限られたサンプル数でベース形状と同等以上の性能を持つ解集団及び翼形 状が得られた.本研究では、今まで適用事例が少なかった有制約の実問題に EPBII を適用し、 圧縮比と断熱効率の最大化を実現する多様な設計候補が探索できた(図 3).



図3 航空エンジンファン設計の多目的ベイズ最適化

2.4 深層学習を用いた航空機翼形状の空力最適化

多設計変数の形状最適化問題では、形状の表現自由度が高まり様々な設計候補を検討できる 一方で、形状のランダムネスが強まることから最適解の探索性能が悪くなる傾向にある.そこ で、深層学習技術の一種である敵対的生成ネットワーク (convolutional generative adversarial network: DCGAN) による形状サンプリングと、畳み込みニューラルネットワーク (convolutional neural network: CNN) による形状フィルタリングを導入することで、多設計 変数の航空機翼形状の空力最適化問題において高効率化に成功した (図 4).



図4 深層学習を用いた航空機翼形状の空力最適化

2.5 異方性を考慮した超音速旅客機の最適化

超音速旅客機は航空機の形状や航空機から地上に至るまでの大気状態などにより伝播の様子 に異方性が生じ得る.この異方性に着目し,低騒音・低抵抗を目的とした最適化計算を実施し た.その結果,飛行経路の変化に強く,ベースラインモデルに比べて低騒音および低抵抗を同 時実現でき,またブームカーペットも全体的に静かで滑らかである形状を探索することができ た(図 5).



図5 異方性を考慮した超音速旅客機の最適化

2.6 回生エアブレーキシステムを考慮した電動航空機エンジンファンブレード最適設計 回生エアブレーキ機構を備えた,既存エンジンの縮小サイズにおける小型旅客機用電動ファ ンエンジンブレードの空力最適設計を実施し,必要推力を満たしつつ回転数の異なる推進時お よび回生時において高効率性能を有するファンの実現を試みた。ファン性能の評価には、準定 常流体解析(メッシュ数 1000 万個程度 1000iteration)を用いて推進時4時間及び発電時4時間 の計8時間要した。ただし、未来創造情報センターのスーパーコンピュータによって計算を実 施した。最適設計のアルゴリズムにはベイズ最適化を用い、初期サンプル 100 個に基づく各最 適化ループを3サンプルで10回実施した。結果として、推進効率と発電効率の値が正となるト レードオフ解を発見することに至った(図 6)。



図6 回生エアブレーキシステムを考慮した電動航空機エンジンファンブレード最適設計

3. 研究目標の達成状況

「最適化」については、必要最小限の解析コストをもって最適設計に導くデータ駆動型最 適化手法を開発し、種々の設計問題において開発手法の有効性を実証した.

4. まとめと今後の課題

データ駆動型の最適化手法を開発し,有効性を実証した.将来的には,「不確かさ解析」や 「データ同化」に関連する問題の解決にも取り組み,データ駆動型アプローチの更なる高度 化を目指す.

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

 Timothy M. S. Jim, Ghifari A. Faza, Pramudita S. Palar, and Koji Shimoyama, "A Multiobjective Surrogate-Assisted Optimisation and Exploration of Low-Boom Supersonic Transport Planforms," *Aerospace Science and Technology*, Vol. 128, September 2022, Article 107747.

- Muhammad Alfiyandy Hariansyah, 下山幸治, "An Artificial Neural Network-Assisted Genetic Algorithm with Application to Multi-Objective Transonic Airfoil Shape Optimization", 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレー ション技術シンポジウム論文集, JAXA-SP-21-008, 2022年2月, pp. 115-124.
- 3. Koji Shimoyama and Atsuki Komiya, "Multi-Objective Bayesian Topology Optimization of a Lattice-Structured Heat Sink in Natural Convection," *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2022.
- 大林茂,千葉一永,下山幸治,三坂孝志,"機械工学とインフォマティクス(設計情報学, 代替モデリング,データ同化からの概観)", 設計工学, Vol. 56, No. 11, 2021年11 月, pp. 539–545.
- Potsawat Boonjaipetch, Koji Shimoyama, and Shigeru Obayashi, "Parametric Study on Waverider Configurations at Low-supersonic Speed for Low-boom Supersonic Transport," *Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences*, Vol. 64, No. 6, November 2021, pp. 325–334.
- Timothy M. S. Jim, Ghifari A. Faza, Pramudita S. Palar, and Koji Shimoyama, "Bayesian Optimization of a Low-Boom Supersonic Wing Planform," *AIAA Journal*, Vol. 59, No. 11, November 2021, pp. 4514–4529.

著書

なし

国際学会

- OAkari Akashi, Timothy Jim, and Koji Shimoyama, "On-Track and Off-Track Low-Boom Supersonic Transport Designs Using Bayesian Optimization," 19th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, 9–11 November 2022.
- oAkari Akashi, Timothy Jim, and Koji Shimoyama, "Comparison of On-Track and Off-Track Designs Optimized for Low-Boom Supersonic Transport," 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology, Niigata, Japan, 12–14 October 2022.
- Muhammad Alfiyandy Hariansyah and Koji Shimoyama, "Aerodynamic Shape Optimization of CRM Wing via Deep Learning-assisted Genetic Algorithm," 33rd Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences (ICAS 2022), Stockholm, Sweden, 4–9 September 2022.
- Koji Shimoyama, "Data-Driven Analysis, Design, and Optimization in Fluids Engineering," 15th World Congress on Computational Mechanics and 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanic, Yokohama, Japan, 31 July–5 August 2022.

- Muhammad Alfiyandy Hariansyah and Koji Shimoyama, "On the Use of a Multilayer Perceptron as an Aerodynamic Performance Approximator in Multi-Objective Transonic Airfoil Shape Optimization," 18th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, 27–29 October 2021.
- OMuhammad Hilmi Al Fatih, Koji Shimoyama, and Kazumasa Kamisori, "An Optimization Study of Strake Implementation on a Spaceplane," 2021 AIAA Aviation and Aeronautics Forum and Exposition (AIAA AVIATION Forum), online, 2–6 August 2021.
- •Yuki Sano, Yuji Akai, Takumi Takahashi, Keisuke Ishii, Kichinosuke Fukuhara, Takeo Kobayashi, and Koji Shimoyama, "Construction of New MBD Process for Valve Train That Realizes Multi-Functional and High-Performance Optimal Design in a Short Time," SAE World Congress Experience (WCX), online, 13–15 April 2021.

国内学会・研究会等

- ○中村勝海,関西一平,下山幸治,"制約条件付き多目的ベイズ最適化における獲得関数 の性能評価",進化計算シンポジウム 2022,札幌, 2022 年 12 月 17-18 日.
- ○中谷直輝,下山幸治, "翼型空力性能予測のための物理情報に基づくニューラルネット ワークの学習コスト削減", 日本機械学会第 35 回計算力学講演会,オンライン, 2022 年 11月 16-18 日.
- ○鎌田大,下山幸治,"説明可能 AI を用いた超低レイノルズ数領域コルゲート翼の多数変数設計探査",第54回流体力学講演会/第40回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム,盛岡,2022年6月29日−7月1日.
- ○下山幸治, "熱流体機械の形状・トポロジーのデータ駆動型設計最適化", ターボ機械協 会第86回総会講演会, オンライン, 2022年5月13日.
- 5. ○明石朱里, Timothy Jim, 下山幸治, "ソニックブーム伝播の異方性に着目した超音速 旅客機形状のベイズ最適化", *日本航空宇宙学会北部支部 2022 年講演会ならびに第3回 再使用型宇宙輸送系シンポジウム*, オンライン, 2022 年 3 月 17–18 日.
- ○Muhammad Alfiyandy Hariansyah,下山幸治,"On the Use of a Multilayer Perceptron Based Surrogate Model in Evolutionary Optimization", 日本機械学会第 34回計算力学講演会,オンライン,2021年9月21–23日.
- 7. ○東田憲太郎,下山幸治,"オートマチックトランスミッションケーシングの多目的設計 探査(軽量化)", 自動車技術会 2021 年度中部支部研究発表会,名古屋,2021 年 7 月 1
 日.
- OMuhammad Alfiyandy Hariansyah,下山幸治,"An Artificial Neural Network-Assisted Genetic Algorithm with Application to Multi-Objective Transonic Airfoil Shape Optimization", 第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレー ション技術シンポジウム,オンライン,2021年6月30日-7月2日.

- 9. ○門脇皓司,劉軍,小野寺淳,米倉充,下山幸治,"HVACユニット内温度場の実験式を 用いた CFD 高精度予測", 自動車技術会 2021 年春季大会,オンライン,2021 年5月 26–28
 日.
- 10. oJun Liu, Jun Onodera, Koji Kadowaki, Mitsuru Yonekura, Yasufumi Konishi, Koji Shimoyama, "An Experimental Study on Mixing Zone of Hot and Cold Air Flow in a Simple HVAC Model", 自動車技術会 2021 年春季大会,オンライン, 2021 年 5 月 26–28 日.
- 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)
 - "世界唯一の高性能ラティス型ヒートシンク構造を創出~積層造形・データ科学・電熱制御の融合による革新的設計~",東北大学流体科学研究所プレスリリース,2022年2月9日.
 - 下山幸治、小宮敦樹、杉原隆夫、廣川啓、石川一郎、田内常夫、"ヒートシンクの製造方法、及び、ヒートシンク",特願 2021-66528, 2021 年4月9日出願.
 - 3. 下山幸治,杉原隆夫,石川一郎,田内常夫,"ヒートシンクの設計方法、及び、ヒートシンクの設計プログラム",特願 2021-66527, 2021 年 4 月 9 日出願.

I.研究成果概要

公募共同研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP01APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月18日提出

数値流体力学解析と細胞実験による血管疾患の機序解明

船本 健一,津田 晋吾

東北大学流体科学研究所 准教授,大学院生

宮内 優

宫崎大学工学部 准教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

高齢化や生活様式の変化によって血管疾患の患者数は年々増加しており,国内外において 高い死亡率を占めている.これまでの研究において,血流動態と血管疾患の関連性が多く報 告されているが,細胞動態,血流現象,疾患の発症・進展の間で時空間スケールが大きく異 なるため,それらの相互作用の詳細は明らかとなっていない.本研究では,血管疾患として 微小血管網の虚血再灌流障害と左心室内の血流動態を対象に,数値流体解析と細胞実験を実 施する.また,それらを融合することで,血流動態と血管疾患の関連について明らかにする ことを最終的な目標とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間の最終目標は次の2つである.(i)大動脈三尖弁と開口形状が異なる2種類の 大動脈二尖弁を用いた数値流体解析による弁形状が左心室内の血流動態に及ぼす影響の解明, (ii)ノイズを含むデータに対する血管透過係数を推定する提案手法の有効性の検証.

2. 研究成果の内容

本研究では、血管疾患の機序の解明と診断・治療・予防方法の確立を目的に、数値流体力学 解析と細胞実験、およびそれらの融合による研究アプローチをとる.両研究機関の研究グルー プが有する数値解析技術と実験技術を組み合わせ、そのシナジー効果を利用する.以下に実施 した研究内容について記す.

2.1 左心室内の血流場に大動脈二尖弁が及ぼす影響の解明

これまでに作成した左心室モデルに対し,異なる形状の二尖弁を設置したモデルを作成した.

各モデルの弁開ロ形状を図(a)に示す.2 つの二尖弁モデルの開口面積は同じである.三尖弁モ デル1種類(Model A)と二尖弁モデル2種類(Model B1および B2)の計3種類の左心室モ デルを用いて血流の数値流体解析を行い,得られた計算結果を比較することで,二尖弁が左心 室内の血流場に与える影響について調べた.数値流体解析には熱流体解析ソフトウェア(Fluent 17.2, ANSYS, USA)を用いて7心周期まで解析を行い,左心室内の血流の変化がほとんど周 期的となる4週目以降の計算結果について考察を行った.

左心室壁に作用する時間平均壁せん断応力(Time-averaged wall shear stress (TAWSS))と 血流停滞を表すパラメータである Relative residence time (RRT)の左心室壁面上の分布をそれ ぞれ図(b)および(c)に示す. 三尖弁モデルに比べて二尖弁モデルでは開口面積が小さいため,弁 を通過する血流速度が大きくなり,弁付近の TAWSS は高くなっている.一方,弁付近以外で はモデル間に大きな違いはなかった. RRT については,Model B1 において Model A および B2 に比べて心尖部で高くなっている.このことより,同じ開口面積をもつ二尖弁であっても,そ の形や開口部位置によって心尖部の血流停滞に与える影響は大きく異なることがわかった.

2.2 血管透過係数を推定するデータ同化手法のノイズを含むデータに対する有効性の検証

血管壁が有する血流と組織間の物質交換を制御する血管透過性は,生体恒常性の維持に不可 欠な性質であり,その異常は種々の血管疾患を誘発することが知られている.本研究では,細 胞実験によって得られる計測データを利用し,血管壁の物質透過性を高精度に推定する解析手 法を確立するため,ノイズを含んだデータに対する提案手法の有効性を調べた.データ同化に 用いる計測データに関しては,データの再現性や取得のし易さから,実際の実験データではな く,膜を介した物質輸送の1次元問題の解析解に正規分布に従うノイズを加えることで擬似的 に生成したデータを用いた.計測データ数と格子点数,計測ノイズ量,試行回数を変化させ, それらによる推定結果を検証した.

解析結果より,透過係数の推定精度は計測ノイズの有無によらず,数値計算の格子点数に影響を受けないことがわかった.この結果は検証問題の解析解が空間に関して線形であることが 原因だと考えられる.実際には濃度分布は直線にはならないため,異なる検証問題を設定し, 格子点数の影響をさらに調べる必要がある.試行回数に関しては,試行回数の増加に伴って透 過係数の平均推定値がある値に収束することや,データに加えたノイズが小さいほどその平均 推定値が真値に近づくことが確認できた.また,計測ノイズが大きい場合でも,計測データ数 を増やすことで推定精度を向上させることができることがわかった.

3. 研究目標の達成状況

当初の計画通り,研究は順調に進んでいる.

4. まとめと今後の課題

左心室内血流に関する研究では、大動脈弁として三尖弁または二尖弁を有する3種類の左心 室モデルに対して血流の数値流体解析を行い、左心室壁面に作用する TAWSS と左心室内の血 流停滞を調べた.三尖弁に比べると二尖弁の方が大動脈弁近傍の壁せん断応力が大きく、また、 開口面積が同じ二尖弁モデルであっても、開口形状が異なると心尖部における血流停滞の度合 いが大きく変化することを明らかにした.二尖弁の形状は今回用いた種類の他にも存在するた めに、今後は今回用いた形状とは異なる開口形状を有する二尖弁モデルを作成して解析を行い、 形状の違いによる左心室内の血流場への影響を詳しく調べる.血管透過係数を推定するデータ 同化手法に関する研究では、提案手法のノイズを含むデータに対する有効性を調べ、ノイズの 大きさによる推定精度や試行回数による収束性を明らかにした.今後は、提案手法の多次元化 や実際の計測データに対する有効性を調べる.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表

学術雑誌(解説等を含む)

1. S. Miyauchi, K. Hosoi, S. Tsuda, T. Hayase, and K. Funamoto: Numerical analysis of hemodynamic changes and blood stagnation in the left ventricle by internal structures and torsional motion. AIP Advances, 13, 045105, (2023).

国際学会

- 1. S. Miyauchi, S. Kosaka, T. Hayase and K. Funamoto: Numerical Analysis of a Blood Flow in the Left Ventricle-Aorta System, Proceedings of the Twenty-first International Symposium on Advanced Fluid Information, (2021), pp. 159-160.
- S. Miyauchi, S. Takeuchi and K. Funamoto: Data assimilation method for estimating membrane permeability based on the Langrange multiplier method: formulation and fundamental examination, 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM-VIII), Yokohama, (2022), 842.
- S. Tsuda, S. Miyauchi and K. Funamoto: Comparison of hemodynamics in the left ventricle between tricuspid aortic valve and bicuspid aortic valves, Proceedings of the 13th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing, Tokyo, (2022), Paper 9.
- R. Shigeru, S. Miyauchi, S. Takeuchi and K. Funamoto: Data Assimilation Method for Estimating Membrane Permeability Based on the Lagrange Multiplier Method: Effect of Signal-to-Noise Ratio on Estimation Accuracy, Proceedings of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2022), pp. 80-81.

国内学会・研究会等

- 1. 津田晋吾, 宮内優, 船本健一: 大動脈二尖弁による左心室内血流場の変化に関する解析, 日本機械学会第32回バイオフロンティア講演会講演論文集, (2022), 2C12.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP03APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月18日提出

プラズマ―生体界面における電荷,電界および

活性種挙動の大規模数値解析

内田 諭

東京都立大学大学院システムデザイン研究科 教授

佐藤 岳彦

東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

この10年で、大気圧放電プラズマを用いた医学応用、すなわちプラズマ医療は大きく進展 し、実用に資する学問体系の構築が急務となっている。特に細胞膜中における放電活性種の 反応輸送工程は医療効果における重要な生体機構の一つであるが、プラズマー生体相互作用 を加味した理論的な定量解析は現時点においても極めて限定的である。

申請者らは平成24-28年度新学術領域研究「プラズマ医療科学の創成」の研究構成員(佐藤:計画班,内田:公募班)として,主にプラズマー生体界面における放電活性種の挙動を 分子動力学シミュレーションにより数値的に検証してきた.こうした研究アプローチはプラ ズマ医療科学の学問分野において,国内で他に行っている例が少なく,関連する海外研究者 からも注目されている.

本研究の目的は,生体膜内における放電活性種の力学的挙動について,量子化学計算(QC) および分子動力学法(MD)により,反応輸送および構造変位を定量的にモデル化することで ある.本課題は,様々な膜組成に対する活性種の浸透性を分子レベルで解明しようとする意 欲的研究である.なお,電荷形成や電界印加による相乗的効果も詳細に検証していく.

1.2 研究期間内の最終目標

上記に示した目的に基づいて、本研究期間内に行う目標課題を以下に示す.

- ① 放電活性種を内在する数値生体膜モデルを構築する.
- ② 膜構成分子と放電活性種との反応過程を定量化する.
- ③ 生体膜中における放電活性種の輸送パラメータを導出する.

④ 電荷電界に対する生体膜変位の特性を把握する.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

本研究では、流体モデル計算や分子動力学法による数値解析の実績を有する報告者が、セン ターの計算機に実装されている解析ソフトウエア(COMSOL および AMBER)を用いて、大 容量並列高速計算によるマルチスケールの解析結果を統計的に精査している.本年度は、流体 ー回路統合モデルおよび生体膜モデルを用いて、誘起膜電位と膜浸透特性を検証した.

2.1 大気圧グロー放電下による誘起膜電位の等価回路検証

昨年度作成した He/N₂ グロー放電の1次元流体近似シミュレーションにより導出したプラ ズマインピーダンスを入力値とし、細胞を多段の抵抗および容量の直並列で近似した等価回 路モデルを構築した.この時に上部水層や細胞膜、また細胞質内に印加される電圧(電界) を定量的に導出した.これらは、先行研究で示された文献の特性と傾向がよく一致していた. さらに、正確な帯電膜の状態を評価するため、電荷流入フラックスを再計算した.

2.2 帯電膜における電気定数変移の考察

広範囲での最終帯電状態を仮定して,対応する誘起電界を想定し,膜電位以下から膜破壊 に至るまでの電界印加を前年度に作成した脂質二重構造の膜分子モデルに適用して分子動力 学シミュレーションを実施した.過酸化水素の膜中自由エネルギーが電界印加によって,正 負極性の側で段階的な変動が生じていることを確認した.これは構成分子の分極性等に変化 が生じた可能性を示唆している.ただし,定量値については,精度の面でやや不確実さが見 られたため、再計算による統計処理が必要である(図参照).

3. 研究目標の達成状況

今回の研究目標において,流体近似計算と等価回路を併用した統合的モデリングから,有機 膜電位を定量的に導出した.また,印加電界に対する膜内自由エネルギー制御の可能性を見出 せたことから,所定の成果が得られたと言える.また,本計算センターに実装された解析ソフ トウエア (COMSOL および AMBER)で,より実際的な並列高速計算による大規模膜解析の 検証も実施できた.本研究期間における目標はおおむね達成できたと思われる.

4. まとめと今後の課題

本研究では、生体膜内における放電活性種の力学的挙動について、放電プラズマと生体膜の モデル構築および高速並列計算による長時間の膜挙動解析の工程を確立し、詳細な細胞部位の 誘起電位や重畳電界下における自由エネルギーや浸透特性を評価することができた. 今後、こ れらの成果を早急に論文等にまとめて、幅広い公開を行っていく予定である. 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

1. Yuta Iwata, Kosuke Takami, Satoshi Uchida, Takehiko Sato: Numerical Analysis of Changes in Transport Properties in Biological Membranes due to Plasma-Induced Charges and Electric Fields, Proceedings of the Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information, (2022), pp.36-37.

2. Yuta Iwata, Ippei Yagi, Kosuke Tachibana, Akinori Oda, Takehiko Sato, Satoshi Uchida: "Changes in the permeation characteristics of ROS through biological membranes by discharge plasma-Induced electric field," 75th Annual Gaseous Electronics Conference (2022), pp. 185-186.

国内学会・研究会等

1. 岩田 優太, 高見 幸亮, 八木 一平, 立花 孝介, 小田 昭紀, 佐藤 岳彦, 内田 諭, 「電界印 加による過酸化水素の生体膜透過特性」, 第70回応用物理学会春季講演会講演予稿集, No. 7 (2023), p. 69.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP05APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

直交格子による超音速/極超音速下における熱流束予測

下山 幸治,大林 茂 東北大学流体科学研究所 准教授,教授 佐々木 大輔,森合 秀樹

金沢工業大学工学部 教授

高橋 俊,山田 剛治

東海大学工学部 准教授,准教授

小川 秦一郎,森 浩一

大阪公立大学大学院工学研究科 助教,教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

近年,民間の宇宙船による宇宙飛行が成功する等,宇宙ビジネスに注目が集まっている. 宇宙旅行をより身近にすることが期待される宇宙往還機では,衝撃波に伴う熱流束の予測が 不可欠であり,CFDにおける精度良い推算が求められている.近年注目を集めている直交格 子法は,実機等の複雑形状に対して容易に解析を実施することが可能であるが,熱流束の予 測精度は実用レベルに達しているとは言い難い.そこで,本研究では,超音速/極超音速流 れ下における熱流束予測精度の向上を目的として,埋め込み境界法の改良を図る.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では,超音速/極超音速流れ下における熱流束予測精度の向上を目的として,埋め込 み境界法の改良を図る.特に,埋め込み境界法におけるイメージポイントの距離を変え,圧 力係数や表面熱流束の変化を明らかにする.具体的な解析対象として,くさび型から生じる 衝撃波背後の熱流束を推算し,構造格子による解析結果との比較を通して妥当性を明らかに する

2. 研究成果の内容

本研究は、複数機関の研究者から構成される共同研究により実施された.その結果、流体解析で得られた結果を議論することで、問題点や改善点について明らかにすることができたため、

非常に意義のある共同研究であった.

くさび型を対象として、埋め込み境界法を使用した直交格子法により、マッハ数 3.0、レイノ ルズ数 10⁵の流れ場の解析を行った.その際、埋め込み境界法に使用する Image Point (IP) の距離を変え、流れ場や熱流束がどのように変化するか調べた.その結果、IP の距離が 1.0 以 下の時、くさび先端で表面圧力が最も高くなるのに対し、IP 距離が 1 より大きくなると表面圧 力の最大位置はくさび先端よりもやや後方に位置していることが確認できた.また、IP の距離 により、衝撃波位置が変化することが確認でき、比較対象とした構造格子による結果と同様の 結果が得られる.しかし、表面熱流束に関しては、IP 位置による変化は見られるものの、構造 格子とは乖離が見られる.

3. 研究目標の達成状況

本研究の目的は、埋め込み境界法の改良を行い、熱流束推算値の向上を図ることであった. 埋め込み境界法で使用するイメージポイントの位置を変えた解析を実施することで、物体近傍 の圧力が変化し、熱流束にも影響を与えることを確認することができた.ただ、構造格子の解 析結果と比較しても熱流束推算値の向上は余り見られず、埋め込み境界法の更なる改良が必要 であることが示された.

4. まとめと今後の課題

本研究では、直交格子法と埋め込み境界法を用いて、くさび型を対象とし、超音速流れ下に おける熱流束推算を行った。衝撃波や圧力に関しては若干の誤差が確認できる一方、熱流束値 に関しては構造格子 CFD 結果との乖離が大きく、更なる改善が必要であることが明らかとな った.また、埋め込み境界法のイメージポイントやくさび型における物体の配置方法を変化さ せることで、物理量の振動が生じることから、今後埋め込み境界法について更なる検討が必要 である.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

Daisuke Sasaki, Kumpei Abe, Hideki Moriai, Shun Takahashi, Gouji Yamada, Shinichiro Ogawa, Koichi Mori, Shigeru Obayashi and Koji Shimoyama: Study on Heat Flux Prediction Method for Cartesian-Mesh CFD Under Supersonic Flows, Proceedings of the Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2022), CRF-62, pp.135.

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP12APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

乱流渦の速度構造と渦線バンドル束形成のトポロジー解析

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授

中山 雄行

愛知工業大学工学部機械学科 准教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

渦は、気象や海洋等の自然現象だけでなく、また風力・火力・原子力発電、航空等の様々 な工学分野に関わる。様々な分野の乱流に影響を与える渦は、ある点・軸の周りを旋回する という独特な流れにより圧力極小の性質を生み出し、また旋回に伴う吸い込み流れが存在す ると渦度の拡散抑制や渦伸長(vortex stretching)による旋回の強化による渦流構造の自己維持 作用を導く。渦領域は、渦流の旋回平面の重ね合わせと考えることもできるが、旋回平面の 渦流並びに本平面群を通る渦線のバンドル束が渦領域を形成・表現していると考えることも できる。

渦線バンドル東は、通過する旋回平面上の渦流構造の変化によりこのバンドル束のトポロ ジーが変化すると考えられるが、一方で渦領域が曲がるときは渦線バンドル東も同様にある 曲率をもって変化する。このときの渦線バンドル東の曲率や曲がる方向の特性を分析するこ とは、渦領域の形成するメカニズムや形を変えながらもその速度構造を維持しようとする渦 の性質の解明に繋がると考えられる。そこで、本研究は、DNS(Direct Numerical Simulation)を 用いて一様等方性乱流の渦の速度構造とそれに基づく渦伸長の詳細な特性、また渦領域を形 成する渦線バンドル東のトポロジーを評価し、バンドル東の曲部の形成と渦伸長との関わり について分析することを目的とする。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、擬スペクトル法を用いた一様等方性乱流の DNS において、有限規模の乱流渦 の速度構造並びに渦領域を通る渦線バンドル束を同定し、速度構造と渦線バンドル束との関 係、並びにこれらによる渦領域の形成に関するトポロジカル特性を明らかにすることを目標 とする。

2. 研究成果の内容

渦中心におけるローカルトポロジーに基づき旋回平面と渦の楕円型渦流の特性に準じたガリ レイ不変の正規直交座標系として渦空間を定義し、渦流の半径方向速度、周方向速度の非軸対 称特性、並びにこれに基づく非軸対称的な渦伸長効果を分析し、渦領域を通る渦線バンドル束 が旋回平面上の半径方向に関する渦伸長特性に従って曲がる傾向があることを確認した。渦線 バンドル束の曲率の評価では、渦度ベクトルの勾配テンソル等を用いて同バンドル束の曲率を 同定するプログラムを開発した。また、渦流の半径方向速度、周方向速度の分布は、渦中心に おけるローカルトポロジーがそれらの主要な特性を定めていることを確認した。

2.1 渦流構造と渦線バンドル束の曲率の同定

渦の速度構造またバンドルのトポロジー(local axis geometry)解析では、渦中心におけるロー カルトポロジーが定める旋回平面に関連づけた渦空間(ガリレイ不変の座標系)を定める。 即ち、渦流の周方向速度の固有ベクトルに基づいて渦流の非軸対称とその方向を同定し、楕 円渦流れの長軸・短軸の方向のベクトルまた旋回平面の法線に平行な正規直交基底を定義す る。渦の速度構造については、本トポロジーに関する swirlity, vortical flow symmetry, sourcity の物理量を評価すると共に旋回平面上の半径方向・周方向速度の分布を計算する。

また、渦線バンドル束は、渦度ベクトルの勾配テンソルを渦空間上で表し、この旋回平面 上におけるトポロジー特性を評価する。更に、渦線の曲率については、前述した勾配テンソ ル並びにフレネ・セレの公式を用いてこの曲率を同定する。

2.2 渦流構造・渦伸長の特性と曲率との関わり

ー様等方性乱流における有限規模の乱流渦は、非軸対称性の渦流構造を有し、また、半径 方向速度並びに周方向速度分布の特性は渦中心におけるローカルトポロジーに従う。即ち、 渦中心におけるローカルトポロジー上の半径方向・周方向速度は2次形式で表されるが、そ れぞれの固有値・固有ベクトルによりこれらの分布が定められ、また半径方向に広がる速度 分布は各々の固有値・固有ベクトルから求められる勾配に従って大きくなることが示された。 ローカルトポロジーが有限規模の速度特性を定めるとき、これらの分布は2次形式に従った 周期性を有することが明らかになった。

渦線バンドル東のトポロジーでは、渦領域が曲がる所では渦線バンドル東も同様に曲がり、 その方向は旋回平面上の半径方向に関する渦伸長(エンストロフィー生成)の方向と統計的 に相関があることを確認した。

3. 研究目標の達成状況

乱流渦の旋回平面上の速度構造は非軸対称であり、これは渦中心におけるローカルトポロジ ーが定める渦流対称性により定められ、また、半径方向速度・周方向速度の分布は共にこのロ ーカルトポロジーに基づく二次形式の固有値と固有ベクトルにより特定づけられることを示し た。また、これらの特性により、旋回平面上の渦伸長作用は、吸込み・湧出し流れの周期性に 応じ、その効果も周期性を有することが確認された。

更に、渦領域中の渦線バンドル束が曲がる際は、旋回平面における渦伸長の伸長方向に従う

傾向があることを示した。これらの成果により、本研究の目標は達成された。

4. まとめと今後の課題

ー様等方性乱流の渦において、非軸対称的な速度構造の特性は渦中心におけるローカルトポロジーにより特定付けられ、半径方向速度、周方向速度も共にローカルトポロジーにおける二次形式により主要な特性が定められる。また、これに伴い旋回平面上の渦伸長は非軸対称かつ 半径方向速度の2次形式と同様な周期性を有する。渦領域中の渦線バンドル東が曲がる方向は、この渦伸長における伸長作用の方向と相関がある。

今後は、半径方向速度・周方向速度分布の波動的特性、また渦線バンドル束の曲がる方向を 一意的に定める要因について解析を行い、渦領域形成のメカニズム解明に繋ぐことを考える。

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

- K. Nakayama: An interactive topological organization of a vortex between vortical flow and bundle of vorticity lines, *Topological Methods in Mathematical Physics*, (2022).
- (2) K. Nakayama and Y. Hattori: Interactive Topological Dynamics between Vortical Flow Structure and Bundle of Vorticity Lines in Turbulent Flow, *Proceedings of the Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information*, (2022), CRF-78, pp. 165-166.
- (3) K. Nakayama: Velocity Structure of a Vortex and Derived Vortex Stretching in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *Proceedings of Nineteenth International Conference on Flow Dynamics*, (2022), pp. 772-774.
- (4) K. Hyoudou and K. Nakayama: The Topological Characteristics of Bundles of Vortical Axes in The Vortical Region in an Isotropic Homogeneous Turbulence, *Proceedings of Nineteenth International Conference on Flow Dynamics*, (2022), pp. 892-894.
- (5) Y. Adachi and K. Nakayama: A Transition of Bundles of Vorticity Lines with Coalescence of Vortical Regions in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *Proceedings* of Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, (2022), pp. 898-900.
- (6) K. Nakayama: An interactive geometrical organization of a vortex between vortical flow structure and bundle of vorticity lines, *The 75th Annual Meeting of American Physical Society Division of Fluid Dynamics*, (2022), A24.00009.
- (7) K. Hyoudou and K. Nakayama: The passing feature of the bundles of the vortical

axes, and topological relationships between the vortex and the vortical axes in an isotropic homogeneous turbulence, *The 75th Annual Meeting of American Physical Society Division of Fluid Dynamics*, (2022), S01.29.

- (8) Y. Adachi and K. Nakayama: A Transition of the Intensity of Vorticity Lines with Coalescence of Vortical Regions in a Homogeneous Isotropic Turbulence, *The 75th Annual Meeting of American Physical Society Division of Fluid Dynamics*, (2022), S01.177.
- (9) K. Nakayama: Vortical flow derived from local flow geometry and its relationships to flow structure of finite-scale vortex in homogeneous isotropic turbulence, *Proceedings* of Twenties International Conference on Flow Dynamics, (2023), (発表予定).

国内学会・研究会等

(1) 中山雄行: 渦構造と渦軸バンドルとの関係に関するトポロジー解析, 第 66 回理論応用力 学講演会講演論文集, (2022), pp. 330-331.

(2) 兵藤京香,中山雄行:一様等方性乱流における渦と渦線バンドルのトポロジカル特性の関係,第66回理論応用力学講演会講演論文集,(2022), pp.247-248.

(3) 足立雄生,中山雄行:一様等方性乱流における渦領域の結合と渦線バンドルのトポロジカル特性,第66回理論応用力学講演会講演論文集,(2022), pp.251-252.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP13APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.04.01 \sim 2023.03.31$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月27日提出

複雑地下構造内の流体流動シミュレーションによる地下構造の逆解析

鈴木 杏奈

東北大学流体科学研究所 准教授

James Minto

University of Strathclyde, Research Associate

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

地下資源開発(例えば地熱エネルギー)では、計測できるデータに基づいて、岩石き裂内(き 裂幅 nm-m スケール)を流れる流体流動を把握する必要がある。複雑な現象をモデル化する場 合,既往研究では変数の次元(自由度)を増やす要素還元論的アプローチをとる.大規模計算が 可能となった近年では複雑な構造でも直接シミュレーションが可能となったものの、この直接シ ミュレーションでは、計算コストがかかり、構造を全て把握しないといけないので構成パラメー タが膨大となり、フィールドスケールの数値計算はほぼ不可能である。資源開発分野では、き裂 を1枚の平行平板と仮定し、流れやすさを表す等価なパラメータをグリッドに与えることによっ て貯留層内の流体流動をシミュレーションする等価モデルがよく用いられる。これは一つの「構 造」から「流れ」を導く手法である。しかしながら、この等価モデルでも、得られた計測データ から地下き裂分布を把握することは困難なため、モデル構成の不確実性が非常に高い。ここで、 井戸で観測される物質移動応答・熱応答と、流動現象ならびに構造との関係性を、当該研究で目 指すデータ駆動型のアプローチによって明らかにすれば、計測データから、地下構造を推定でき る可能性を示すことができる。当該研究では、一つの井戸から還元冷水とともに注入され、他の 井戸で計測される試薬の濃度変化ならびに温度応答とに着目し、不均質な多孔質体の複雑な流体 流動・物質移動・熱移動を定式化することを目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

当該研究では、3D プリンタを活用した構造制御型流動実験と数値シミュレーションを実施する。 複数のき裂ネットワークパターンを用意し、2 つのタイプの数値シミュレーションによって、そ の流動現象、物質移動現象、ならびに熱移動現象を計算する。一つは、直接シミュレーションを 行う OpenFOAM、もう一つは多相多孔質体の流体・物質移動・熱移動シミュレータ TOUGH2 であ る。得られた数値計算結果を学習データとして、機械学習に基づいたデータ駆動型アプローチに よって、複雑な構造と、流動現象との関係を定式化する。

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

本研究では、トレーサー応答から流路開口幅を推定する手法を提案し、その妥当性を検証 した。検証用のき裂モデルを Fig. 1 に示す。長さ 50mm、直径 35mmの円柱型となっており、 その中に横幅 20mm、開口幅一定の平板型のき裂が存在している。また、流入口と流出口は長 さ 1mm、直径 35mm で設けている。

作成したき裂モデルに対して、OpenFOAM(ver.7)®を用いて数値シミュレーションを実施し、 トレーサー応答を取得した。OpenFOAMによる数値シミュレーションでは、まず流動計算を 実施する領域のメッシュを作成した。(snappyHexMesh)。次に SIMPLE 法によって定常状態を 求めた (simpleFoam)。最後に移流拡散方程式によってトレーサー応答を取得した (scalarTransportFoam)。数値シミュレーションを行った際の各パラメータの設定値を Table 1 に 示す。また、トレーサーの注入はシミュレーション開始から 2 秒後まで一定濃度 1[-]で注入し た。



Fig. 1 Single parallel-plate model.

Parameter	Value
Fluid viscosity [Pa·s]	9.32×10-4
Fluid density [Pa/m ³]	997.5
Diffusion coefficient [m ² /s]	1.0×10-8

Table 1 Physical parameters in OpenFOAM.

本研究では、2通りの条件において、開口幅の推定を行った。1つ目は開口幅が異なるき裂 モデルを用いた際の推定である。Fig. 3のき裂モデルにおいて、開口幅がそれぞれ 0.20mm、 0.40mm、0.60mm、0.80mm、1.0mm の 5 つのき裂モデルに対して流量一定で数値シミュレー ションを行った。2 つ目は異なる Péclet number での開口幅の推定である。Péclet number は移 流と拡散の比を表す無次元数である。Péclet number *Pe*の値によって移流と拡散の影響のどち らが支配的になるかは Table 2 によって表される。本研究では、開口幅が 0.60mm のき裂モデ ルにおいて、*Pe* が 36、3.6、1.8、0.36、0.14 となるように流量を設定した。

Table 2 Effects of advection and diffusion by Péclet number.

Péclet number Pe	Effects of advection/diffusion
<i>P</i> e < 0.4	Diffusion dominated.
0.4 < <i>Pe</i> < 5	Advection and diffusion are equal.
5 < Pe	Advection dominated.
100 < <i>Pe</i>	Diffusion can be neglected.

取得したトレーサー応答から最適化を行い、推定した開口幅を示す。Fig. 2(a)はFig. 1の開 ロ幅が異なるき裂モデルで推定した流路開口幅の結果である。Fig. 4(a)から、使用したき裂モ デルの開口幅が大きくなるにつれて、推定した開口幅が大きくなることが確認できる。その ため、平均滞留時間を用いて単純な流路構造を推定できると言える。

次に、異なる Péclet numberにおいて開口幅を推定した結果を示す。Fig. 2(b)は、各 Péclet number において、使用したき裂モデルの開口幅(0.60mm)と推定した開口幅の差を表す。Péclet number が 0.4 より大きく、移流の影響が存在している場合には、推定した開口幅は実際のき裂の開口 幅に近い値を示した。一方で、Péclet number が 0.4 より小さくて拡散の影響が支配的になる と、推定した開口幅とき裂の開口幅の差が大きくなった。Péclet number が小さいときは、ト レーサーの移動において濃度勾配の影響が大きくなる。そのため、トレーサーの平均滞留時 間と流体が流路を流れる時間の差が大きくなったことで開口幅の推定精度が悪化したと考え られる。ここから、平均滞留時間を用いた開口幅の推定はトレーサーの流れにおいて移流の 影響が大きいときに可能であることがわかった。



Fig. 2 Estimated aperture results for simple fracture structures. (a) Estimation results at different apertures. (b) Estimation results at different Péclet numbers.

複雑なき裂構造において、トレーサー応答から推定した開口幅とPH解析で求めた流路開口 幅の比較を行った。複雑なき裂モデルでは、平行平板型のき裂の代わりに、Fig.3に示したよ うな複数の円板型のき裂によって構成されるモデルを作成した。作成した複雑なき裂構造に 対して、数値シミュレーションを行い、トレーサー応答を取得した(Fig. 4(a))。取得したトレ ーサー応答の構造を解析することで、流路数を想定し、移流拡散方程式の解を基に最適化を 実施した(Fig. 4(b))。最適化によって取得した各流路のトレーサー量と平均滞留時間、および 構造解析から推定した流路表面積が取り得る大きさから各流路の開口幅の大きさを求めた。 Fig. 5 には、各流路の開口幅が取り得る大きさの範囲を箱ひげ図によって示している。このト レーサー応答から推定した開口幅と PH 解析によって求めた開口幅の比較を行った。PH 解析 で求めた開口幅の流路数が Fig. 6 に示す。PH 解析の結果、Fig. 3 のき裂モデルでは、開口幅 が 0.4mm から 1.6mm の流路が計 20 本存在することが確認された。

トレーサー応答から推定した各流路の開口幅の大きさと PH 解析で求めた開口幅の比較を 行った。Fig.5の灰色で示された部分が、PH 解析で求めた開口幅の大きさである 0.4~1.6mm を示している。Fig.5から、トレーサー応答から推定した各流路の開口幅の大きさの範囲に、 PH 解析で求めた開口幅の範囲が含まれていることが確認できる。よって、複雑なき裂ネット ワーク構造において、トレーサー応答から推定した開口幅の大きさは、パーシステントホモ ロジー解析と同程度であることが確認できた。



Fig. 3 Example of a complex fracture model.



Fig. 4 Numerical simulation in the complex fracture structure. (a) Tracer response. (b) Optimization based on the solution of the advection-diffusion equation.



Fig. 5 Comparison of aperture estimated from tracer response and from PH analysis.



Fig. 6 Number of flow paths per aperture determined by PH analysis.

- 3. 研究目標の達成状況
- (1) 3D プリンターを用いた構造制御流動実験と数値シミュレーション
- 2 次元破砕ネットワーク (Thin, Thick, Variable fracture network)。100%
- -3次元破壊ネットワーク100%
- (2) 持続的相似性による複雑な亀裂構造の定量化 100%

4. まとめと今後の課題

本研究では、トレーサー応答を解析することで流路の開口幅の大きさを推定し、PH 解析から 求めた流路開口幅と比較を行った。得られた知見は以下の通りである。

- 1. 単純なき裂構造では、移流の影響がある場合に、トレーサー応答から移流拡散方程式に よる最適化の結果を利用して流路開口幅を推定することが可能である。
- 2. 複雑なき裂ネットワーク構造において、トレーサー応答から推定した各流路の開口幅と、 PH 解析によって求めた流路開口幅は同程度である。

課題としては、最適化アルゴリズムの修正が必要であり、その後、論文化する予定である。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

· A. Suzuki, M. Miyazawa, J. M. Minto, T. Tsuji, I. Obayashi, Y. Hiraoka, and T. Ito, "Flow estimation

solely from image data through persistent homology analysis", Scientific Reports, 11, 17948, DOI: 10.1038/s41598-021-97222-6 (2021).

- ・ 鈴木杏奈, "地下資源開発における「かたち」と「ながれ」", ながれ, 38(1), 21-25 (2019).
- ・ 鈴木杏奈(分担執筆),"数理・情報科学を活かした地下構造の解析が拓く、持続可能な地熱 資源利用の未来", MDB 技術予測レポート(DVD), pp. 14 (2023).

著書

国際学会

- A. Suzuki, "Topological data analysis for flow in porous media", The 17th International Conference on Flow Dynamics, Online, October 28-30, 2020.
- A. Suzuki and J. Minto, "Data-driven modeling of flow in complex structures", The 20th International Symposium on Advanced Fluid Information, Online, October 28-30, 2020.
- A. Suzuki, M. Miyazawa, T. Ito, and P. Kang, "Estimating flow characteristics of 3D fracture network based on persistent homology", InterPore2020, Online, August 31-September 4, 2020.
- M. Miyazawa, A. Suzuki, and T. Ito, "Topological data analysis for estimating flow characteristics of 3D fracture network", the 16th International Conference of Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 6-8, 2019.
- A. Suzuki, M. Miyazawa, M. Konno, and T. Ito, "Topological characterization of 3D printing fracture networks", InterPore 11th Annual Meeting, Valencia, Spain, May 6-10, 2019.
- A. Suzuki and J. Minto: Data-driven modelling of flow in complex structures, *Proc. the 21st International Symposium on Advanced Fluid Information*, 2021.
- A. Suzuki and J. Minto, "Data-driven modelling flow in complex structures: Flow modelling of microbially induced carbonate precipitation", Proc. the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information, 2022.
- A. Suzuki, "New Descriptors and Estimations of Structures of Flow Paths in Fractured Rocks", CouFrac 2022, Berkeley, CA, USA, November 16, 2022.

国内学会・研究会等

- ・ 鈴木杏奈, "パーシステントホモロジーを用いた地下き裂岩体内の流動・輸送挙動評価", 研究集 会「データ駆動型解析で推し進める変動帯ダイナミクス研究の深化」, 東京大学地震研究所共 同研究 (2018-B-01), Online, February 22, 2021.
- ・ 鈴木杏奈, 宮澤美幸, 大林一平, 平岡裕章, 伊藤高敏, "岩石内の流れを推定するパーシステントホモロジー", 日本応用数理学会 2020 年度年会, Online, September 8-10, 2020.
- 招待講演, Anna Suzuki, "Characterization of Relationships between Flow and Fracture Structures by Persistent Homology", I2CNER 国際ワークショップ CO2 貯留研究部門, 九州大学エネルギーウ ィーク 2020, Fukuoka, Japan, January 31, 2020.
- ・ 宮澤美幸, 鈴木杏奈, 岡本敦, 大林一平, 平岡裕章, 伊藤高敏, "パーシステントホモロジーを用いた3次元き裂ネットワークの構造評価", 日本地球惑星科学連合2019年大会 (JpGU2019), Makuhari, Japan, May 26-30, 2019.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

- ・ 東北大学プレスリリース・研究成果 HP, 複雑な構造の"かたち"から"ながれ"を直接予測 岩石
 内の流体流動をトポロジーによって読み解く, 2021.9.22,
 <u>https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2021/09/press20210922-01-flow.html</u>
- ・ 子供の科学 2021 年 12 月号, "岩石内の水の流れがトポロジーで解ける!", 2021.11.10

- · 日刊工業新聞, 2021.9.24
- · JSTnews, さきがける科学人, 2021.9.1
- · ナイスステップな研究者 2022 選定 科学技術・学術政策研究所, 2022.12.
- ・ 東北大学ディスティングイッシュトリサーチャー称号付与 東北大学, 2023.1.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP14APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	2022.04~2023.03
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

Direct numerical simulation of high Rayleigh number natural convection

Atsuki Komiya

Institute of Fluid Science, Tohoku University Professor Nicholas Williamson, Steven Armfield and Junhao Ke The University of Sydney Senior Lecturer, Professor, Research associate

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

Natural convection has been extensively studied over the last decades. Previous literature focuses on the mechanics and statistics of the turbulent natural convection in a regime where the friction Reynolds number is relatively small. More recently, evidence suggests that the turbulent natural convection boundary layer immediately after laminar—turbulent transition has a turbulent outer part whereas its near-wall region is still laminar-like. This is suggestive that the turbulence development of the natural convection boundary layer is comprised of two different stages: a regime where the flow has laminar near-wall but turbulent outer bulk at small Re, and a fully turbulent regime at higher Re. Our study examines such development by looking at a temporally developing natural convection boundary layer with Prandtl number Pr=0.71. We will for the first time examine this flow, using a large scale direct numerical simulation, in the transitional and fully turbulent flow at very high Rayleigh number regimes to obtain a detailed understanding of the flow structure of turbulent NCBLs.

1.2 研究期間内の最終目標

The present study aims to determine the existence of the so-called 'ultimate' regime for turbulent natural convection flow, and, if it exists, to understand how the turbulent flow transitions to the ultimate turbulent regime as well as the turbulent structures in the ultimate regime. This information is crucial to accurately predict the heat transfer characteristics in large scale industrial and geophysical applications.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 新しい解析手法の開発(例)

Using a massively parallelised incompressible Navier-Stokes solver with Buossinesq approximation,

we have employed our direct numerical simulation with over a billion structured finite volume grids in a rectangular computational domain. This is so-far the highest Grashof number (Gr) DNS dataset for natural convection boundary layers. With detailed statistics provided by DNS, we are able to analyse turbulent mechanisms and structures, as well as to develop essential models for turbulent NCBL flows.

2.2 新しい現象の解明(例)

Our studies reveal that the natural convection flow has two distinct turbulent regimes - a weakly turbulent regime as have been observed in most experiments in literature, and an ultimate turbulent regime where the flow can be well-modeled by a plume-like outer region and a near-wall part. We have also revealed that in the classical regime shear is minimal and turbulence is maintained predominately by the shear layer in the outer part of the boundary layer (i.e., plume-like region).

3. 研究目標の達成状況

As mentioned above, based on our analyses we have proposed a buoyancy-modified log-law for the mean streamwise velocity, a layered structure modelling for highly turbulent flow which connects the ultimate heat transfer to the log-type velocity profile, determined how does the flow transition from a 'classical' regime to an ultimate regime and the Gr scaling in relation to skin friction and heat transfer. These results have resulted in 3 JFM papers --- one of these papers is also featured in JFM *Focus on Fluids*.

4. まとめと今後の課題

Our studies show mechanistic evidence of the existence of a second turbulent regime using a temporally developing framework with Oberbeck—Buossinesq (OB) conditions. However, many modern applications of natural convection flows operate in a regime at a large temperature difference where the fluid properties vary significantly and the classical assumption of Oberbeck—Boussinesq is not valid. Although the flow behavior is similar, the transition to ultimate regime is generally thought to be affected by multiple factors: e.g., spatial gradients in spatially developing flows, the background stratification, and non-Buossinesq effects. Our ongoing work aims to examine if the conclusions drawn from the temporal framework with OB condition can be applied to the spatially developing flow with NOB conditions. We believe the OB effects, as well as the spatial gradient effect, can be further analyzed to offer valuable insights into flow control strategies in real-world applications with continuing HPC support.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Law of the wall for a temporally evolving vertical natural convection boundary layer, Journal of Fluid Mechanics, 902, A31.
- 2. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, High Grashof number

turbulent natural convection on an infinite vertical wall, Journal of Fluid Mechanics, 929, A15.

3. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, The turbulence development of a vertical natural convection boundary layer, Journal of Fluid Mechanics, 964, A24.

著書

NA

国際学会

- J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Application of an Integral Model to an Unsteady Natural Convection Boundary Layer, The 11th Australasian Natural Convection Workshop, Sydney, NSW Australia, Dec. 2019.
- J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Integral modelling of an unsteady natural convection boundary layer, The 22nd Australasian Fluid Mechanics Conference, Brisbane, QLD Australia, 7-10 Dec. 2020.
- J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, Turbulence statistics in a temporally evolving turbulent natural convection boundary layer. In 12th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Sydney, NSW Australia, 30 June - 1 July 2022.
- 4. J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, A. Komiya and S. E. Norris, Turbulent vertical natural convection boundary layers --- Insights gained from DNS up to Gr = 1.8e8. In 12th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, Sydney, NSW Australia, 30 June - 1 July 2022. (Keynote)
- J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield, S. E. Norris and A. Komiya, Heat transfer and friction characteristics of a turbulent natural convection boundary layer, The 23rd Australasian Fluid Mechanics Conference, Sydney, NSW Australia, Dec. 2022.
- J. Ke, N. Williamson, S. W. Armfield and A. Komiya, APS DFD, Washington DC, USA, Nov. 2023.

国内学会・研究会等 NA

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)NA

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP15APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	2022.4 ~2023.3
報告回数	第 1 回報告

2023年7月19日提出

表面修飾ナノ粒子/分散媒のナノスケール界面現象に関する研究

小宮敦樹 東北大学流体科学研究所 教授 久保正樹,庄司衛太,斎藤高雅 東北大学大学院工学研究科 教授,准教授,大学院生 菊川豪太 東北大学流体科学研究所 准教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

ナノ粒子を溶媒中に分散させたナノフルイド,あるいは高分子中に内包させたナノコンポ ジット材料は、ナノ粒子の空間構造を制御することによって様々な性質を発現できることか ら、広範な分野への応用が期待されている.本研究では、ナノフルイドを用いた材料の塗布・ 乾燥プロセス、ナノ粒子/溶融ポリマーの設計・最適化に資するため、種々の有機溶媒ある いは高分子溶融体と表面修飾ナノ粒子(有機分子を表面に修飾した無機ナノ粒子)からなる ナノ粒子/分散媒のナノスケール界面現象について、分子動力学(MD)シミュレーション、数 値流体力学(CFD)-離散要素法(DEM)-自由表面連成シミュレーション、位相シフトエリプソメ トリ計測を用い、ナノスケールの観点から解明する.

1.2 研究期間内の最終目標

MD シミュレーションにおいては、表面修飾ナノ粒子と溶媒との親和性に着目し、界面構造と親和性との関係を明らかにする。CFD-DEM 連成シミュレーションにおいては、ナノ粒子表面の修飾有機分子による粒子間相互作用を考慮した CFD-DEM 連成シミュレータを用いて、表面修飾ナノ粒子を含むナノフルイドの表面張力測定結果を理論面から検証する。位相シフトエリプソメータにおいては、表面修飾ナノ粒子を含むサスペンション液滴の溶媒蒸発時の濡れ挙動を明らかにする.

2. 研究成果の内容

研究分担者の久保らは、これまで表面を有機分子で修飾したナノ粒子を対象として、MD シ ミュレーションを用いた媒体との親和性の評価、DEM および CFD-DEM 連成シミュレーショ ンを用いて、ナノ粒子の分散・凝集挙動、流動状態、乾燥挙動に関する基礎的検討を行い、親 和性/プロセス条件/材料構造の相関の解明に取り組んでいる。研究代表者の小宮は、これま で単成分液滴のミクロスコピックな濡れ性評価を高精度な光学測定手法により進めてきた. そこで、両者のこれまでの実績を有機的に結び付け、ナノ粒子/分散媒のナノスケールでの界 面現象を数値シミュレーションと実験の両方を駆使して解明し、塗布乾燥プロセスならびに 溶融混練プロセスへの応用展開を目標として、共同研究に至った.研究期間において、以下の 知見を獲得することができた.

2.1 表面修飾ナノ粒子/有機溶媒間の親和性の評価

全原子分子動力学(MD)計算を用いて有機修飾無機固体/有機溶媒界面の親和性を評価した。 固体は表面を水酸化したα-Al₂O₃,修飾鎖および溶媒には炭素鎖長さの異なるカルボン酸およ び飽和炭化水素を用いた.親和性の指標には付着仕事を用い,熱力学的積分法の一種である phantom-wall 法により算出した.全ての計算は LAMMPS を用いて行った.

修飾鎖の修飾率を 50%とし,各修飾鎖および各溶媒における表面修飾 Al₂O₃/溶媒界面近 傍の構造を可視化した.溶媒がヘキサンの系では,修飾鎖の炭素数が6および10の場合,修 飾鎖層は無秩序な構造であり,溶媒は修飾鎖層へ浸透した.一方で,修飾鎖の炭素数が18の 場合,修飾鎖の配向が見られ,溶媒は修飾鎖層へほとんど浸透しなかった.修飾鎖炭素数が10 の系では,いずれの溶媒でも,修飾鎖の配向は不規則であり,溶媒は修飾鎖層へ浸透した.

界面垂直方向の密度分布から溶媒の浸透度を求め、付着仕事との相関を調べた。浸透度と付 着仕事には正の相関が見られた.異なる修飾鎖長の系を比較すると、浸透度の差が大きいため、 溶媒の浸透度に及ぼす修飾鎖長の影響は大きいと考える.異なる溶媒鎖長の系を比較すると、 浸透度の差が少ない一方、付着仕事の値に違いが見られた.これは溶媒の密度など他の因子も 付着仕事に影響しているためと考える.

2.2 表面修飾ナノ粒子含有有機溶媒の表面張力測定および固液間の親和性の評価

表面張力は Pendant Drop 法で測定した.ナノ粒子にはデカン酸修飾 CeO₂(粒径 6 nm)を, 溶媒には *cis*・デカリン,トルエン,シクロヘキサン,デカンを用い,種々の濃度のナノフルイ ドを調製した.

全原子 MD シミュレーションにより,固液間の親和性を評価した.親和性評価には濡れ係数を用いた.固液間の付着仕事と溶媒の表面張力を計算することで,濡れ係数,そして接触角を算出し,親和性を評価した.接触角の値から,固液間の親和性はデカン系が最も高いことがわかった.これは表面張力測定から評価した接触角と同様の傾向であった.

次に、気液界面への粒子吸着を理論的に評価するため、離散要素法に流体と界面形状を連成 した CFD-DEM-自由表面連成シミュレーションを行った.気液界面の粒子被覆率はトルエン では 0.24 であった.同様の計算にて、シクロヘキサンでは 0.28 であった.接触角と被覆率の 関係より、吸着粒子数が多い場合に値は接触角の値は MD 計算値に近づくことがわかった.

2.2 表面修飾ナノ粒子含有ナノフルイドの拡張濡れの観測

ナノ粒子には超臨界水熱法で合成したデカン酸修飾 CeO₂(粒径 6 nm)を, ナノ粒子の分散媒には各種 *m*アルカンを用いた.ナノ粒子濃度 0.1 wt%のナノフルイドを調製し, ナノフルイ

ド液滴をインクジェット装置により Si 基板上に滴下し、位相シフトエリプソメータによるナノ液膜観測を実施した.1つのインクジェット液滴体積は約300pL であり、滴下量を滴下数10-1000滴で変更した.

純 **n**アルカンおよびナノフルイドの最大拡張時の接触線近傍ナノ液膜長さと最大接触半径 との相関を検討した。いずれの溶媒を用いた場合も,正の相関を示した。純溶媒とナノフルイ ドを比較すると,全体的にナノフルイドの方が接触線近傍ナノ液膜は長いことが確認された。 よってナノ粒子の存在はナノ液膜の発達に寄与することが示された。

次に,接触線近傍のナノ液膜の長さとナノフルイド液滴の最大接触半径との関係を検討した。ヘキサンの場合を除き,ナノフルイドは純溶媒よりも拡張した.一方で,同じ分散媒で比較すると,最大接触半径は,接触線近傍ナノ液膜長さとほとんど相関がないことが示唆された.

3. 研究目標の達成状況

研究成果に示す通り, MD シミュレーションによる表面修飾ナノ粒子/媒体界面の親和性評価により, ナノスケールの界面構造と親和性との相関を解明することができた。また, ナノフルイドの表面張力測定および MD シミュレーション, CFD-DEM-自由表面連成シミュレーションに基づく濡れ性の評価, ナノフルイドの拡張濡れにおけるナノ液膜観測により, ナノフルイドの濡れ現象に関する重要な知見を実験的, 理論的に獲得することができた. よって, 当初の目的を達成できたと判断する.

4. まとめと今後の課題

本研究により,有機修飾ナノ粒子を高濃度分散させたナノフルイドの設計指針が示されると ともに,表面修飾ナノ粒子含有ナノフルイドの塗布プロセスの設計・最適化において有用な知 見を獲得する方法論を確立できた.今後は,確立した実験および理論的評価技術を活用し,(ナ ノ粒子-溶媒間の親和性)-(ナノフルイド中のナノ粒子の構造)-(ナノフルイドのミクロ 動的濡れ特性)の相関を明らかにするとともに,溶融高分子系へと展開し,有機修飾ナノ粒子 を用いた材料製造プロセスにおけるプロセス条件とナノ粒子構造体の構造を解明することが 望まれる.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

 Takamasa Saito, Ryo Takebayashi, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys: Effect of surface modifier and solvent on the affinity between the surface-modified solid and organic solvent: A molecular dynamics study, *AIPAdvances*, 22 (2022), 105206.

国際学会

2. Eita Shoji, Taiga Saito, Akira Hoshino, Tetsushi Biwa: Phase-shifting ellipsometer based on pixelated polarization camera to measure nano-thick liquid film and nanoparticle deposits, The 13th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing (PSFVIP13), (2022).

- Eita Shoji: Drying patterns of sessile nanofluid droplets: Measurements with phaseshifting ellipsometry, Japan/Korea/Taiwan Chemical Engineering Conference 2022, (2022).
- 4. Takamasa Saito, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys: Molecular Dynamics Study of Interfacial Affinity between Surface-Modified Inorganic Solid and Polymer, The 13th Asian Thermophysical Properties Conference (ATPC2022), (2022).
- 5. Takamasa Saito, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Eita Shoji, Gota Kikugawa, Donatas Surblys, Atsuki Komiya: A Study on Nano-Scale Interfacial Phenomena between Surface-Modified Nanoparticle and Dispersed Media, The 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022).
- 6. Akira Hoshino, Taiga Saito, Eita Shoji, Tetsushi Biwa, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri: Superspreading in wetting of sessile nanofluid droplets: measurements of nano-thickness films near contact lines, The 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022).
- 7. Taiga Saito, Akira Hoshino, Eita Shoji, Tetsushi Biwa, Masaki Kubo, Takao Tsukada, Takaaki Tomai, Tadafumi Adschiri: In-situ measurements of thin nanofluid films and deposition patterns of drying droplets in inkjet processes, The 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022).

国内学会・研究会等

- 8. 斎藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, SURBLYS Donatas: 表面修飾無 機固体/ポリマー界面における分子構造と親和性の評価, 第 59 回日本伝熱シンポジウム, (2022).
- 9. 庄司衛太,星野瑛,齋藤大河,琵琶哲志:凝縮膜を有する基板上のアルカン液滴の先行薄膜の形状測定,第59回日本伝熱シンポジウム,(2022).
- 10. 星野瑛, 齋藤大河, 庄司衛太, 琵琶哲志: 低粘度液体の先行薄膜の拡張形態の変化, 第22 回日本伝熱学会学生発表会, (2022).
- 11. 庄司衛太: 光で測るナノフルイドの動的濡れ ーナノ液膜と粒子パターン形成の相関-, 第 30 回東北支部若手の会セミナー, (2022).
- 12. 斎藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, SURBLYS Donatas: 分子動力学 シミュレーションによる表面修飾無機固体/高分子間の界面親和性の評価, 第 43 回日本 熱物性シンポジウム, (2022).
- 13. 竹林遼,斎藤高雅,久保正樹,塚田隆夫,庄司衛太,菊川豪太,SURBLYS Donatas:表面修飾 Al₂O₃/有機溶媒界面のナノスケール構造と親和性の相関の解明,化学工学会新潟 大会 2022, (2022).
- 14. 斎藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, SURBLYS Donatas: 表面修飾無 機固体/高分子界面のナノスケール構造と親和性に関する分子動力学解析, 第 36 回分子 シミュレーション討論会, (2022).

- 15. 庄司衛太, 星野瑛, 齋藤大河, 琵琶哲志, 久保正樹, 塚田隆夫, 笘居高明, 阿尻雅文: イ ンクジェットナノフルイド液滴の超拡張濡れのメカニズム検討, 化学工学会第 88 年会, (2023).
- 16. 斎藤高雅, 久保正樹, 塚田隆夫, 庄司衛太, 菊川豪太, SURBLYS Donatas: 分子動力学 シミュレーションによる表面修飾無機固体/高分子間の界面特性の評価, 化学工学会第 88 年会, (2023).
- 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

受賞

- 17. 第59回日本伝熱シンポジウム優秀プレゼンテーション賞,表面修飾無機固体/ポリマー 界面における分子構造と親和性の評価,斎藤高雅,2022.5.19,日本伝熱学会.
 優秀学生賞,表面修飾 Al₂O₃/有機溶媒界面のナノスケール構造と親和性の相関の解明, 竹林遼,2022.11.10,化学工学会.
- Best Poster Presentation Award, A Study on Nano-Scale Interfacial Phenomena between Surface-Modified Nanoparticle and Dispersed Media, Takamasa Saito, 2022.11.11, Executive Committee of International Conference on Flow Dynamics.
書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP16APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

回転二重円すい間に発生するテイラー渦の安定性と乱流遷移

足立 高弘, 秋永 加奈, 谷田 開

秋田大学理工学研究科 教授,技術職員,大学院 M2

小宮 敦樹

東北大学大学院工学研究科 教授

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

流体に回転運動を与えたときの不安定現象についての研究は,混合を考慮するような多く の産業用途にとって重要である.例えば,回転システムの研究はあらゆる同心駆動装置やタ ービンロータなどの回転機械設計に役立つだけでなく,小型の回転熱交換器やミキサーなど 化学装置の最適化にも役立つ.これらの流れをより良く制御するためには,流れの不安定性 が発生する臨界パラメータや,不安定性による流れのパターンの遷移メカニズムを解明する 必要がある.本研究では,ミキサー等のモデルとして,同心同軸で回転する二重円すい間の 流れを取り扱う.

本研究ではアスペクト比が有限で容器の上下に蓋のある系において,円筒の側壁が傾斜した同心二重円すいの場合を取り扱う.既往の研究で扱われた傾斜が無く無限に長いクラシカルな同心二重円筒内のテイラー流れの場合とは異なり,不安定現象の様相は傾斜の影響で不完全分岐となり複雑となることが予想される.また,回転による遠心力の斜面成分により,このシステムでは回転と同時にテイラー・クエット流と似た渦が生じることが先行研究より分かっているが,それらの渦の遷移条件等の詳細については不明なままである.そこで,本研究では二重円すい間内の渦形態が遷移する条件を解明するために,スペクトル・エレメント法を用いた固有値解析を用いて安定性解析を行い,流れが遷移する臨界点とその後の遷移現象を分岐理論を用いて明らかにする.さらに,OpenFOAM 等の流体解析ソフトを用いて遷移後の流れを計算し,渦の時間的な挙動を追跡することで,混合,摩擦や伝熱などの工学的な応用量を計算し,高効率な回転機械の開発に繋げる.

1.2 研究期間内の最終目標

ニュートン流体と非ニュートン流体の両方について,回転数と粘度の変化に対して流れが 不安定になる臨界点を線形安定性解析により求める.さらに,トルクや熱伝達係数などの物 理量を OpenFOAM 等の流体解析ソフトを用いて明らかにする.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 共同研究の意義

本研究では二重円すい間内の渦形態が遷移する条件を解明するために、スペクトル・エレメ ント法を用いた固有値解析を用いて安定性解析を行い、流れが遷移する臨界点とその後の遷移 現象を分岐理論を用いて明らかにする.本研究課題は複雑な非線形力学系の問題となっており、 伝熱工学と流体力学を合わせた高度な総合工学の範疇に入る.そのため、流体科学研究所にお ける熱流体に関する研究者と共同で研究を行うことには大変意義がある.

2.2 本研究の独創性

本研究で取り扱う回転二重円すい間に発生するテイラー渦流れは、シンプルな分離装置とし ての独創性を有している.円筒の斜面が傾斜しているため、遠心力の分力が斜面に沿っても作 用することで、密度の異なる液体や微粒子の分離を円筒の内側と外側に促進するだけでなく、 円すいの底部と上部へも分離することが可能となる.さらに、粘度や非ニュートン性の変化に よる影響を考慮して、高効率な分離機としての応用が期待できる.

わが国のものづくり企業は医療機器に活かすことができる高い技術を有しているにもかかわ らず,現状の国内売上額(2.8 兆円)に占める輸入額の割合は49%程度であり輸入超過で推移 している.この現状を打破すべく海外との競争も視野に,医療分野での分離装置としての応用 を念頭に研究を行う.例えば,赤血球や血中のアルブミン等の分離をすばやく適切に行うこと で血液検査を円滑に行えるような装置の開発が本研究の位置付けとなる.

3. 研究目標の達成状況

2022 年度は、側壁が傾斜しない場合の同心二重円すい形状の場合について、スペクトル・エレメント法を用いた時間発展方程式の数値計算を実施した. 図 1(a)は有次元系における物理モデルであり、図 1(b)は無次元系における物理モデルである.



(a) Dimensional

(b) Non-dimensional (Γ, η, ϕ) should be given.

図1物理モデル



図2時間発展の結果



図3 定常解と撹乱の重ね合わせ、線形安定性解析からの予想



図2は、図1(b)に示される無次元パラメータが Γ =3.75、 ϕ =0 でレイノルズ数が Re=130 の場合の計算結果を示している.レイノルズ数が130近辺で、定常流から非定常流への分岐が 生じており、図2では分岐後の非定常流の速度が振動している様子を示している.得られた非 定常解の構造としては、図3に示されるように1対の渦を有する定常解に、2対の渦を有する 微小な撹乱場が重ね合さった結果と考えられる.図4は、分岐後の時間発展解の3次元的な構 造を可視化した結果である.周方向の撹乱モードが1となっている.より詳細な解の分岐構造 や解のモード解析について今後も進めていく.

4. まとめと今後の課題

本研究では同心二重円筒間内の渦形態が遷移する条件を解明するために,線形安定性および 非線形分岐理論を用いた安定解析を行った.さらに,分岐が生じた後の流れを基礎方程式の時 間発展をシミュレーションすることで明らかにすることを試みた.今後は,得られた数値シミ ュレーションの結果を用いて動的モード解析を行うことを検討している.動的モード解析では, 多数のモードが出力され,対象とする現象を説明する支配的なモードがどのモードであるかを 動的モード解析の結果のみから特定することは一般に難しい.そこで,線形安定解析から得ら れた不安定モードと動的不安定解析で得られたモードの比較を行い,現象を支配するモードを 抽出する方法の確立を目指す.

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)
 国際学会
 - T. Adachi, W. Toshiharu, K. Akinaga, A. Komiya, D. Henry, V. Botton: Stability and Transition to Turbulence of Taylor Vortex in a Gap between Rotating Two Cones, Proceedings of the 21th International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, (2021)
 - 2) Hiraku Yata, Kana Akinaga, Valery Botton, Atsuki Komiya, Takahiro adachi, Nonlinear Bifurcation and Dynamic Mode decomposition for Taylor Vortex in Gap between Rotating Two Cylinders/Cones, Twentieth International Conference on Flow Dynamics, Sendai, (2023)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP17APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月6日提出

ふく射熱遮蔽機能を有する消防装置の開発

岡島 淳之介

東北大学流体科学研究所 准教授

古川 琢磨

八戸工業高等専門学校産業システム工学科 准教授

江目 宏樹

山形大学理工学研究科 准教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

本研究の目的は、火災現場における熱ふく射の遮蔽に貢献し、延焼や火傷などの被害を軽 減するための消防装置を開発することにある.具体的には、最適化された水滴ミストを使用 して熱ふく射の遮蔽を実現し、消防車両の自衛噴霧に応用することを検討する.この技術の 開発により、「水の節約」と「ふく射遮蔽」の両方を同時に実現することを目指す.将来的に は、消防職員の可搬自衛噴霧装置など、広範な範囲で消防職員の命と安全を守るための技術 への応用を目指す.

火災現場のような高温環境では、「ふく射伝熱」が重要な要素となる.炎だけでなく、目に 見えない熱ふく射も消火活動に大きな影響を与える.この熱ふく射による延焼や火傷などを 防止するために、消防設備の開発が求められている.大規模な火災(例:林野火災)では、 ふく射による延焼が支配的な役割を果たすことがあり、この研究成果は特殊な災害にも貢献 する可能性がある.従来の消防設備は、散水能力に特化して設計されてきたが、ふく射遮蔽 を考慮すると、水量の少ないミスト層の方が水量の多い水膜よりも優れたふく射遮蔽性能を 持つことが示されている.現在の消防車両の自衛噴霧は、噴霧粒子が大きく、広範囲に水を かけて車両を冷却するために有用だが、ふく射遮蔽には寄与しない.ふく射遮蔽機能を組み 込むことで、自衛噴霧の機能を向上させることができる.

ウォーターミストなどのふく射性媒体は,高温環境の対流・ふく射伝熱に重要な影響を与える.しかし,実際の火災現場では火炎のスペクトル特性が時間的に変化するため,ガスや煤の生成量やスペクトル特性の予測が困難であり,複雑な物理現象が存在するため,ふく射性 媒体が熱流動場に与える影響を純粋に評価することは困難である. 先行研究では,正方形キャビティ内で非灰色吸収性ガスを使用した自然対流の乱流解析や, 開放空間で異なる吸収係数を持つふく射性媒体を使用した鉛直加熱平板内の乱流解析が行われ,壁面の放射率やガスの吸収によって乱流渦構造が大きく変化することが示された.

ふく射性媒体は流動場を安定化または不安定化させる役割を果たす.これらの原理を応用 し、非灰色吸収-散乱性媒体であるウォーターミストを使用することで、高温自然乱流場にお けるふく射熱の遮蔽だけでなく、対流熱伝達を能動的に制御することが可能になる.これに より、スプリンクラーやウォーターミストを使用した消火設備の高機能化が期待される.

一般的に、対流・ふく射の複合伝熱に関する研究では、吸収性媒体や散乱性媒体のみを含む 灰色媒体として扱われることが多く、散乱が等方的であると仮定される.しかし、非灰色吸 収・非等方散乱性媒体であるウォーターミストにはこれらの仮定は適用できない.

したがって、ウォーターミストによるふく射熱遮蔽や流動場の能動的制御の可能性を明ら かにするためには、ふく射性媒体の吸収や散乱特性、非等方性や非灰色性などを考慮したふ く射熱輸送解析コードを開発し、ウォーターミストを含む対流・ふく射の複合伝熱解析に基づ いてウォーターミストが熱流動特性に及ぼす影響を定量的に評価する必要がある.

1.2 研究期間内の最終目標

実際の火災場では、火炎のスペクトル特性の時間変化、燃焼により発生するガス・煤の量 やそれらのスペクトル特性等、複雑な物理現象が混在している.そのために、数値シミュレ ーションの観点から問題を単純化し、ウォーターミストの混入が高温流動場に及ぼす影響の みを純粋に評価することを目指す.本研究の目的達成に向けて、非灰色吸収・散乱性媒体であ るウォーターミストを混入させた場合の高温環境下での自然対流解析を行う.

本研究ではふく射伝熱が支配的な高温流動場を想定していることから,流動場内に混入す るウォーターミストのふく射モデリング精度は解析結果に大きく影響を及ぼす.商用 CFD ソ フトウェアでもふく射性媒体のモデリングや対流・ふく射の複合解析は可能であるが,ふく射 性媒体の取り扱いが吸収のみ・等方散乱など限定的である,ふく射輸送解析には簡易的な近 似モデルのみが導入されている等,ふく射輸送解析に優れたものは多くない.そこで本研究 では,機能の拡張が比較的容易である OpenFOAM をカスタマイズし,新たに散乱性媒体, 非等方散乱現象,ふく射性媒体の非灰色性を考慮できるふく射輸送解析ライブラリを実装す る.始めに本研究で実装したふく射輸送解析コードの精度検証を複数実行し,高精度ふく射 輸送解析が可能であるかどうかを詳細に調査する.続いて実装したふく射輸送解析ライブラ リを用いて非灰色の吸収・非等方散乱性媒体であるミストを含んだ場合の対流・ふく射の複合 解析を行う.そして,乱流場において非等方散乱性媒体がどのような影響を及ぼすかを厳密 且つ詳細に明らかとするために乱流の直接数値シミュレーションを行う.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 共同研究の意義

本研究では、ミストの熱流動および蒸発現象に関する深い知識を持つ岡島、ふく射伝熱と 対流熱伝達の複合解析に精通した古川、そして散乱性媒体のふく射伝熱に関する専門知識を 持つ江目が協力し、複雑な物理現象が混在する火災現象に取り組む点に学術的な意義がある.

2.2 対流・ふく射の複合伝熱解析

非灰色の吸収 - 散乱性媒体であるミストを含むふく射伝熱解析の解析モデルを図1に示す. この計算モデルは周囲の壁を黒体であると仮定し、1 つの高温黒体壁と 5 つの低温黒体壁から構成された、各辺 1.0 m の 3 次元正方形キャビティである. 低温黒体壁と高温黒体壁の温度は、それぞれ温度 T_h = 1000K, T_c = 0K と仮定した. 高温黒体壁から放射されるふく射がキャビティ内に伝わり、高温黒体壁と対称にある低温黒体壁のサンプルライン: z [m]でふく射熱流束を取得した. ただしキャビティ内には直径 $d_{p,w}$ = 20 µm の非灰色吸収、散乱性媒体であるウォーターミストを含む系となっている. 計算格子数は 213、光線数は N_{Ray} = 800 とした. 本解析では波長に対する Band 数及び光線数の違いによる無次元ふく射熱流束と Wuらのモンテカルロ光線追跡結果 (Oluwole et al., "Nongray models for radiative absorption and anisotropic scattering by water droplets in fire CFD simulations", Fire Safety Journal, Vol. 120, 2021) を比較した.



図1:解析モデル

始めに *d_{p,w}* = 20 μm の水粒子群で構成されるウォーターミストが混入した場合で,光線数 の依存性を評価するために,光線数を少なくし精度を担保できるかの検証を行った.図2に 結果を示す. *N_{Ray}* = 800 の時,ふく射熱流束が収束し,先行研究の結果と概ね一致している ことが確認できる.従って,光線数が *N_{Ray}* = 800 であれば精度を担保できることを示した. 続いて *d_{p,w}* = 20 μm の水粒子群で構成されるウォーターミストが混入した場合のふく射熱 流束分布を図3 に示す. Band の数に関わらず,全ての条件で MCRTM の結果と良い一致を 示している.これにより,計算コストの小さい 4Bands でも高精度の結果が得られることを 示した.

3. 研究目標の達成状況

本研究では、対流・ふく射の複合伝熱解析を行い、ウォーターミストが火災乱流場に与える影響について評価した.ウォーターミストを用いた消防装置開発における実用環境下に近い場合のふく射伝熱現象に関する理解を深めた.これらの知見を活用して、可搬自衛噴霧装置や消火ホースなど、消防職員の命を守る技術の開発に貢献することが期待される.



図2:光線数の比較



図 3: バンド数の比較

4. まとめと今後の課題

本研究では、乱流自然対流の熱伝達特性におけるふく射熱伝達の役割を明らかにするために、 OpenFOAM を使用して吸収-非等方散乱性媒体であるミストを含む対流・ふく射の複合解析を 行った.解析結果からは、ふく射物性の違いが高温乱流場における対流・ふく射熱伝達特性に 影響を与えることが示され、これらの要因が光学厚さや前方散乱強度による可能性が示唆され た.

ただし、現状では水滴の蒸発の影響を無視している.そこで今後は、周囲環境からの伝熱の ミスト層への影響を把握するため、水滴の経時変化に対するスペクトル応答評価を行う予定で ある.また、ミスト全体の蒸発モデルを実装する前に、単一水粒子の蒸発過程と共に、蒸発過 程における水粒子のふく射特性の変化を再現できるコードを実装する.ふく射伝熱を考慮した 単一水粒子の蒸発過程に関する知見を得た後、ミスト全体の蒸発モデルの実装を目指す.

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

江目宏樹: 散乱性媒体によるふく射伝熱制御, 伝熱, Vol. 62, (2023), pp. 8-13, https://www.htsj.or.jp/wp/media/2023-4.pdf.

国際学会

H. Gonome, Y. Takagi, K. Suzuki, J. Okajima, T. Kogawa: Radiation and Convection Coupling Calculation in a Direct Numerical Simulation for Misting Fire Extinguishing Devices, Proceedings of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI2022), (2022). pp. 24-25.

H. Gonome, K. Suzuki, Y. Takagi, S. Moriya, J. Okajima, T. Kogawa: SPECTRAL TRANSMITTANCE MEASUREMENT OF WATER MIST FROM DUAL FLUID NOZZLE IN INFRARED REGION, Book of Abstracts of the 10th International Symposium on Radiative Transfer, RAD-23, (2023), pp. RAD-23 P02.

国内学会・研究会等

江目宏樹:山形大学における伝熱研究の紹介 ~ 散乱性媒体によるふく射伝熱制御 ~,山形 大学マテリアル人材育成セミナー(第2回),米沢,(2022).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP18APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月12日提出

ステントデザイン最適化のためのチャンバー内流れ解析

安西 眸

東北大学流体科学研究所 助教

Narendra Kurnia Putra

バンドン工科大学 講師

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

血流が組織/細胞に及ぼす影響を調べるには、人体の直接的測定の他、チャンバーと呼ばれる 微小流路を容器内に作製し、その中に細胞を播種した後に流れを負荷し、細胞の応答調べる ことにより行う方法がある。チャンバー内に血管に存在する細胞(内皮細胞)を播種し血液 を模した液体を流すことで、チャンバー内の内皮細胞への影響を調べることができ、血流の 影響を調べる上で非常に有効な手段である。

細胞実験ではチャンバーシステムに定常流を与え、ディッシュ平面上での細胞挙動を検 討してきた.しかしながら近年の疾患治療においては、血管内に医療機器を留置する低 侵襲医療の割合が増加していることから、複雑形状の医療機器周辺における細胞挙動を 調べることが重要である.

これまでに我々研究グループでは、世界で唯一ステント上の細胞挙動を定量化するチャンバーを開発し、実験を行ってきた.チャンバーの改良により、より複雑な形状を模したステントワイヤーをチャンバー内に留置することが可能となり、本研究ではチャンバー内の流れ場を解析し、インビトロ細胞実験の結果と比較することで流れが血管内皮細胞に与える影響を調べ、血管に留置後、ステントが完全に内皮細胞に覆われる(内皮化)までの時間を最短にするステント形状を探索することを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

改良したフローチャンバーシステムを用い、より複雑な形状のステントワイヤーを留置した際の血管内皮細胞挙動を調べ、数値流体力学解析により得られる流れ場と対照させることを目的とする.実際のステントは複数本のワイヤーの組合せから成るため、流れ角度に対し45°、90°の角度で2本のワイヤーを固定し、24時間の流れ負荷実験を行った.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 共同研究の意義

- 本研究は最適化を行うインドネシアグループと細胞実験を行う東北大グループの共同研究である.細胞実験は非常に繊細で数をこなすことが難しいため、スーパーコンピュー タシステムを用いた CFD により実験結果の補間をすることで、流れ刺激に対する細胞応 答の傾向を見出すことを目的とする.本共同研究を基にして、国内のみならずハンガリ ーとの共同研究が始まったことからも、学際的な国際共同研究として非常に発展性が高いと考えられる.
- 2.2 ワイヤー角度が血管内皮細胞挙動に与える影響の解明
 - チャンバー内の2本のワイヤー間のギャップが内皮細胞の分布に及ぼす影響や内皮化効果を 研究するため、流れに対して45°および90°でワイヤーを固定し、24時間の流れ負荷実験 を行った. CFD 解析と比較を行った結果、ワイヤー間ギャップに存在する細胞密度が高い領 域は、壁せん断応力が高い領域と一致した.ワイヤー後流領域では、ワイヤー角度に沿って 細胞密度が変化しており、CFD 解析で見られるワイヤーで剥離した流れの再付着領域周辺で 高い細胞密度が見られた.ワイヤー側面においては、下流側側面の方が上流側側面よりも内 皮化率(細胞密度)が高かった.
- 3. 研究目標の達成状況

細胞実験と CFD 解析結果の比較検証を行った結果,高壁せん断応力,高壁せん断応力勾配分布 が細胞挙動に影響を与えることが明らかになった.特に2本のワイヤー留置によって剥離,再 付着を含むより複雑な流れが形成され,ワイヤー上流・下流側面における表面内皮化の違いが 明らかとなった.本研究成果は原著論文として雑誌掲載され(別刷),7件の口頭発表(うち1 件招待講演)につながった.

4. まとめと今後の課題

これまで細胞実験ではチャンバーシステムに定常流を与え、流れ負荷が与える影響の解析 を行ってきた.しかしながら、実際の生体内においては血流は非定常であり、拍動性を持 つ流れ負荷は疾患発症に関連すると考えられている.したがって、今後は拍動流細胞実験 を行うためにチャンバーシステムに改良を加え、その中の流れ場を算出するため拍動流計 算を行う

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Zi Wang, Narendra Kurnia Putra, Hitomi Anzai and Makoto Ohta: Endothelial Cell Distribution After Flow Exposure With Two Stent Struts Placed in Different Angles, Frontiers in Physiology, 12:733547 (2022), DOI: 10.3389/fphys.2021.733547

Makoto Ohta, Naoya Sakamoto, Kenichi Funamoto, Zi Wang, Yukiko Kojima, and Hitomi Anzai: A Review of Functional Analysis of Endothelial Cells in Flow Chambers, Journal of Functional Biomaterials, 13(3):92 (2022), DOI: 10.3390/jfb13030092

国際学会

M. Ohta, Z. Wang, Y. Kojima, N. K. Putra, N. Ohtsu, H. Saifurrahman, H. Anzai: Flow chamber for evaluation of Endothelial cell adhesion on stent struts, Chemistry Physics and Biology of Colloids and Interfaces, 2022/6/6-10, Hungary

Yukiko Kojima: The effect of stent angle on flow and endothelialization process, Mini workshop between IFS and Lyon,2022/6/9, France

Yukiko Kojima, Zi Wang, Narendra Kurnia Putra, Naofumi Ohtsu, Hitomi Anzai, Makoto Ohta: The Effect of Stent Angle on Flow and Endothelialization Process in a Parallel Chamber, 9th World Congress of Biomechanics, 2022/7/10-14, Online

Narendra Kurnia Putra, Mikha Hilliard, Muhammad Rafi Sudrajat, Bonfilio Nainggolan, Makoto Ohta, Hitomi Anzai: Development of Open-Source Deployment Method for Simulation and Optimization of Balloon Angioplasty and Stent Geometry Design based on Numerical Simulation, 19th International Conference on Flow Dynamics, 2022/11/9-11, Japan

Hanif Saifurrahman, Zi Wang, Yukiko Kojima, Makoto Ohta, Hitomi Anzai: Observation of Endothelial Cell Response to Various Stenting Deployment in an In-Vitro Flow System, ELyT Workshop 2022, 2022/11/16-18, France

国内学会・研究会等

Hanif SAIFURRAHMAN, Zi WANG, 小島有紀子, 安西眸, 太田信: Observation of Endothelial Cell Migration and Morphology under different values of Oscillatory Shear Stress (OSI) in a flow chamber, 日本機械学会 第 33 回バイオフロンティア講演会, 2022/12/17-18, 神戸

小島有紀子,王子, Narendra Kurnia Putra,大津直史,安西眸,太田信:ステント角度が 細胞挙動に及ぼす影響,2022 年度 東北大学金属材料研究所共同研究ワークショップ 日本 バイオマテリアル学会東北ブロック講演会,2022/10/26,仙台

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP25APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月19日提出

物理駆動機械学習を用いた有機材料の構造物性相関の解明

菊川 豪太 東北大学流体科学研究所 准教授 Hari Krishna Chilukoti National Institute of Technology (NIT) Warangal, India 助教

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

有機材料や高分子材料などソフトマテリアルの熱流動特性,機械特性の予測は広い科学・ 工学の領域で重要となっている.このような要望の高まりに合わせ,実験を代替するvirtual testingとしての物理シミュレーション技術に加え,データ科学の技術を利用した材料特性の 予測や材料開発,すなわちマテリアルズ・インフォマティクス(MI)が注目を集めている. これまでの先行研究の多くは,データ駆動的な側面が強く,膨大なデータを集約して物性の 予測精度を上げるという研究の方向性が主である.しかしながら,扱う材料種や物性によっ ては,簡単にデータを収集することが難しいものもあり,スモールデータのみ利用できる場 合であっても予測精度の高い方法論の提案が求められる.そこで,本研究では物理駆動的な 機械学習(physics-guided machine learning)による MI 技術の構築を目指している.着目 する物性と相関の高い分子スケール構造データや物性データを見出し特徴量選択に利用する ことで,これまでに無い機械学習手法を構築することを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

分子動力学(MD)シミュレーションによる分子スケール構造や物性計算に基づき,単純 な物性のみの機械学習による物性予測精度を超える機械学習手法の提案を目指す.本研究で はまず,SOM(自己組織化マップ)を用いて物性間の相関や分子スケール構造データと物性 との相関性を見出す.また,比較的小さなデータセットにおいても高い予測精度が見込める ガウス過程法(GPR)による機械学習予測手法を用いて,入力した他の物性や構造を反映し た記述子から着目する物性を予測する交差検証を行う.最終的に,どの記述子や物性がGPR による予測精度向上に寄与するかを評価する. 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

有機液体材料の MD シミュレーションを実施し,動径分布関数 (RDF) 解析に基づく分子 スケール構造データを取得した.また,化学構造特性を反映する分子記述子を生成し,SOM を用いて物性との相関性を明らかにした.このように,SOM は物性と相関の高い構造データ を抽出するために有効である.

物性予測を実現するガウス過程法をさらに高速化するため、機械学習用パッケージを用いたハイパーパラメータの最適化および回帰分析を実装した.その他の物性データを入力データとすることで教師データを作成し、5分割交差検証を用いて物性予測精度の検証を行った. その結果、分子記述子をベースにした予測手法は、平均10%以下の精度で欠損データを予測できることが明らかとなった.

3. 研究目標の達成状況

ガウス過程法による物性予測手法の高速化に成功した.また,分子記述子を基にした予測 精度の向上に成功した.

4. まとめと今後の課題

本研究によって, SOM が分子スケール構造データや分子記述子と物性との相関性をうまく 抽出できる手法であることを示した.また,ガウス過程法は,物性データを高い精度で予測可 能であることを明らかにした.今後は,分子記述子の探索空間を広げ,GPR による予測精度の 向上を狙う.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

国内学会

1. 菊川 豪太, 鈴木創太, クラスタリングとベイズ予測機械学習を用いた用いた有機・高分子 材料の高効率探索, 航空機フォーラム in 大阪, (発表予定).

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP31APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

実気象条件下におけるソニックブーム評価関数の開発

Development of sonic boom evaluation function under real meteorological conditions

鵜飼 孝博,井浦 玲伊 大阪工業大学 講師,修士2年

Hiroshi Yamashita, Bastian Kern Institute of Atmospheric Physics, German Aerospace Center

三坂 孝志

産業技術総合研究所

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

ソニックブーム低減が必要不可欠である超音速旅客機開発において、ソニックブーム騒音に 影響を及ぼす気象(温度・湿度・風)を考慮したソニックブーム推定および機体設計が求め られる.そこで、気象に応じてソニックブーム低減が可能である、飛行ルートの最適化を実 現させるため、本 SEIRA (Sonic-boom Evaluation In Realistic Atmospheres) project では、 気象に対するソニックブーム騒音変動をモデリングしたサロゲートモデルの開発を目指し、 過去 10 年間の気象データの生成およびソニックブームの伝搬解析を行う.

1.2 研究期間内の最終目標

サロゲートモデルを構築するためには、気象データとソニックブーム騒音の関連性を調査す る必要がある.そこで、本研究では、過去10年間の気象データを用いてソニックブーム伝搬 解析を行い、気象変動とソニックブーム騒音の関連性を明らかにする.特に、次世代超音速 機である低騒音(低ソニックブーム)機体を調査対象とし、サロゲートモデル構築に必要な データを取得する. 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 新しい解析手法の開発(例)

本研究では、東北大学流体科学研究所所有のスーパーコンピュータを用いて、過去 10 年間の 気象データを基に約 51,000 回の衝撃波伝搬解析を行い、大規模なデータを取得する.気象生 成には、DLR が開発した EMAC モデルを用いて全球の気象シミュレーションを行い、AirTraf モデルにより疑似コンコルドおよび低ソニックブーム機体(LBC: Low-Boom concept)の飛 行経路直下の気象プロファイルを抽出する.そして、気象データを基に大阪工業大学が衝撃波 伝搬解析(ソニックブーム騒音の推定)を行い、産業技術総合研究所がサロゲートモデル構築 を担当する.このように複数の研究・教育機関が連携して研究を進めている.本報告書では、 衝撃波伝播解析結果に関して、疑似コンコルドおよび LBC 機体から発生するソニックブーム に対する気象の影響および大気乱流干渉の影響について主に報告する.

本伝播解析に用いた季節別の 10 年間の気象プロファイルを図 1 に示す. なお,本研究では 2009 年 3 月から 2019 年 2 月においてヒースロー空港(LHR)からジョン・F・ケネディー 空港(JFK)間のコンコルド飛行直下の気象プロファイルを使用した.また,KZK 方程式ベ ースの圧力波伝播解析ツールを用いて,大気中を長距離伝播する圧力波を模擬し,大気状態が ソニックブーム波形に及ぼす影響を評価した.このツールでは熱粘性吸収,緩和吸収,幾何拡 張成層化および非線形歪に加え,波の回折や大気乱流による影響も評価できる.大気乱流の影 響を調査する際は,伝播解析において回折効果を評価した.なお,超音速飛行時のソニックブ ームの伝播解析を行うため,亜音速飛行である離着陸時に生じる圧力伝播は評価対象外とし た.



図1 飛行直下の気象プロファイルの季節ごとの統計値(実線:平均値,破線:標準偏差),左 図:相対湿度,右図:温度.MAM:3~5月,JJA:6~8月,SON:9~11月,DFJ:12~2 月.

2.2 新しい現象の解明(例)

図2に飛行経路直下の地上で得られた疑似コンコルドおよびLBCのソニックブーム波形の 10年間の最大過剰圧を示す.先行研究によると,低湿度中に衝撃波が伝播する場合に圧力 が減衰する.本気象プロファイルでは,冬季の湿度(平均68.1%)が夏季(平均76.1%)よ り低く(図1),冬季にコンコルドおよびLBCの最大過剰圧が減衰しているため(図2), 湿度の影響で最大過剰圧が変動していると考えられる.このような季節ごとの圧力変動は, 疑似コンコルドおよびLBCの両機体において現れているものの,LBCの標準偏差は疑似 コンコルドより小さい.なお,図中の実線および灰色の塗り潰しが,それぞれ平均値および 標準偏差を示す.



LBC 機体において気象による変動が小さい理由は、それぞれの波形が持っている周波数 成分と関係すると考えられる.先行研究によると、大気中の気体分子種によって異なる圧力 減衰を引き起こし、高/中周波数帯において分子緩和による減衰効果が強くなることが分か っている.図3に疑似コンコルドおよびLBCの圧力波形の周波数成分を示す.疑似コンコ ルドは、高高度(14 km)から低高度(2 km)まで高周波成分を維持している.一方、LBC では、疑似コンコルドに比べて周波数成分の強度が低く、低高度になると高周波数成分が比 較的強く減衰する.これは、疑似コンコルドと比較して、LBC 機体から発生する圧力波形 が滑らかであるため(図4(b))、高周波成分が低いと考えられる.つまり、LBC 波形は、 湿度の影響を受けにくいため、10年間において最大過剰圧の変動が少ないと考えられる. なお、圧力波形に対する非線形効果や熱粘性効果も作用するため、必ずしも分子緩和が支配 的とならない点に注意されたい.



(a) 疑似コンコルド機体

(b) LBC 機体

図3 伝播高度における周波数成分の平均値(1波形/月×12ヶ月×10年間=120波形の 周波数成分の平均値).



図 4 10年間の気象データを基に算出した地上のソニックブーム波形

LBC のソニックブーム波形は、大気乱流の影響も受けにくいことが分かった.気象観測 で得られたデータを基に疑似的に大気境界層内の乱流場を生成し、伝播解析を行った.伝播 解析における膨大な計算を避けるため、夏季と冬季における特定の場所において伝播解析 を行った.図5に大気乱流干渉によって歪んだソニックブーム波形を示す.疑似コンコル ド機体では、乱流干渉していないN字型波形(図5(a),黒線)が、乱流干渉によってスパ イク型(赤線)やラウンド型(青線)に変形しており、先行研究と同様な結果となった.一 方、LBC 機体では、最大過剰圧が極端に上昇するスパイク型波形の歪みは現われなかった. また、乱流干渉によって2倍の最大過剰圧が現われる疑似コンコルドの波形に対して、LBC の波形では、1.5倍程度の最大過剰圧しか現れなかった(図6).つまり、低ブーム波形は乱 流干渉の影響を受けにくいことが分かった.なお、LBCと疑似コンコルドの乱流効果を比 較するため、図6のヒストグラムにおいて同じビンサイズを使用した.





(a) 疑似コンコルド機体
 (b) LBC 機体
 図 6 乱流干渉による最大過剰圧の変動

3. 研究目標の達成状況

飛行ルート直下の 10 年間の気象データを用いて衝撃波伝播解析を実施し、コンコルドおよび 低ブーム機体のソニックブーム波形を取得し、低ブーム機体に対する気象変動とソニックブー ム騒音の関連性を明らかにした.また、低ブーム波形の大気乱流の影響も明らかにした.この ようにサロゲートモデル構築に向けた知見と大規模データの準備が整った.よって、本年度の 目標は達成できた.

4. まとめと今後の課題

本研究では、過去10年間の気象データを用いてソニックブーム伝搬解析を行い、気象変動とソ ニックブーム騒音の関連性を調査した.その結果、高周波成分の強度が弱い低ブーム波形は、 高周波成分の強いN字型波形よりも気象変動の影響を受けにくいことが分かった.また、低ブ ーム波形は、大気乱流干渉の影響も受けにくいことが分かった.今後は、本研究で得られた知 見および膨大なソニックブーム波形と気象データを基にサロゲートモデルの開発を行う.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

国際学会

- H. Yamashita, B. Kern, T. Ukai, R. Iura, T. Misaka, S. Obayashi, "Sonic-boom Calculation of a Realistic North Atlantic Flight," 18th International Conference on Flow Dynamics, Sendai (online), 2021, CRF-60.
- [2] H. Yamashita, B. Kern, R. Iura, T. Ukai, T. Misaka, S. Obayashi, "Sonic boom variation of North Atlantic supersonic flight," 19th International Conference on Flow Dynamics, Sendai (online), 2022, CRF-75.
- [3] R. Iura, T. Ukai, H. Yamashita, B. Kern, T. Misaka, S. Obayashi, "Acoustic propagation analysis of sonic boom at atmospheric variation during 10-year flight," inter-noise 2023, 2023 (発表予定).

国内学会・研究会等

 [1] 井浦玲伊, 鵜飼孝博, H. Yamashita, B. Kern, 三坂孝志, 大林茂, "10 年間の気象データ を基にした実フラ イト上におけるソニックブームの伝播解析," 第 54 回流体力学講演会 /第 40 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2B10, 2022.

5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等)

[1] 井浦玲伊, 鵜飼孝博, "10 年間の気象データを用いた実フライトルート上におけるソニッ クブームの伝播解析," 大阪工業大学 卒業論文, 2021.

書式 (1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP34APR22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

高速電離流を伴う宇宙航行システムの数値的研究

高橋 聖幸, 鈴木 颯一郎, 経沢 直樹, 佐藤 星貴

東北大学大学院工学研究科 准教授, D1, M2, M2

永井 大樹

東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

生命や宇宙の起源の解明を目的とした深宇宙探査や、火星など他天体の探索・移住ミッシ ョン実現に向け、従来の化学推進よりも燃費が良く輸送ペイロードの大質量化が見込まれる 電気推進システムが近年注目され、より性能の高い推進機確立を目指して研究開発が盛んに 行われている.現在主流となっている電気推進システムは電極でイオンを加速する静電加速 型であり、比較的低推力密度であるが燃費に優れるイオンスラスタと、比較的高推力密度で あるが燃費性能には劣るホールスラスタの二種類が実用化され、実際の衛星運用に使用され ている.その二種類の内、特にホールスラスタは空間電荷制限効果による推力リミットを受 けずに、更なる大推力化が出来るのではと期待はされているものの、放電チャネル内で生ず るプラズマ不安定性に起因して荷電粒子の磁場閉じ込めが弱化し(荷電粒子の輸送が古典的 な拡散理論の値よりも増える事から、異常輸送現象と呼ばれる)、理想通りの推進性能に達し ないという点が問題視されている.放電チャネル内におけるプラズマ不安定性を抑制する事 が出来れば更なる高推力スラスタを開発可能である一方で、そもそもプラズマ不安定性の発 生原因がよく分かっておらず、どのようなアプローチでプラズマ不安定性を抑制すれば良い のかが定かではない.また、プラズマ不安定性発生がどのような過程を経て荷電粒子の磁場 閉じ込めを弱めるのかも分かっておらず、推進性能の改善を困難にしている.

プラズマ不安定性解析の難しさは、放電チャネルにおけるプラズマ輸送の複雑さによるものが大きい.ホールスラスタの放電チャネルは電場 E と磁場 B とが直交して印加されており ExB ドリフトが発生するのに加え、磁場勾配を受けて勾配ドリフトが発生し、更にはプラズマ密度勾配に起因する反磁性ドリフトも発生するなど、様々なドリフト運動が混在して複雑化しており、理論解析やシミュレーションにおけるモデル化などを困難にしている.このようなプラズマ流に対しては極力近似を抑えた粒子計算が望ましいと言える事から、本研

究では Particle-in-Cell (PIC) シミュレーションを実施し, ExB 放電チャネルにおけるプ ラズマ不安定性の再現と荷電粒子挙動を明らかとする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究の最終目標は、電子とイオンの運動論的振る舞いを記述する事が出来る PIC 法を 用い、ExB 放電チャネルにおける不安定現象を再現する事である.加えて、不安定現象がど のような過程を経て異常輸送現象を引き起こすのかを解明する事を目的とする.ホールスラ スタの ExB 放電チャネルにおいては、時間的、空間的に様々なスケールの不安定性が現れ ることが知られているが、本研究では近年特に注目されている電子サイクロトロンドリフト 不安定性(ECDI) にターゲットを絞り、粒子シミュレーションを実施する.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

流体科学研究所の永井教授はプラズマを伴う高速流の権威であり、本研究で対象とする放 電チャネルにおけるプラズマ流に対しても、永井教授が有する知見を活用出来ることから共 同研究の意義は大きいと言える.

本研究では、ECDI による荷電粒子異常輸送を再現するために、ホールスラスタの軸方向-周方向を想定した 2 次元 Full PIC シミュレーションを行なった. イオンと電子の運動方程 式を Buneman-Boris 法を用いて数値積分して粒子軌道を求め、2 次元 Poisson 方程式を Mudpack ライブラリにより解く事で電場を算出した. 粒子の位置情報から weighting 計算 によって格子点上での電荷密度を求め、それを Poisson 方程式へとフィードバックする事で 荷電粒子と場とをカップリングした. 簡単化のため計算領域外部に電極が存在することを仮 定し、電位の軸方向 (X) の境界には Dilichlet 境界条件 (X=0 cm で 200 V, X=2.4 cm で 0 V) を適用した. 実際のホールスラスタは周方向 (Y) に数 10 cm 程度の長さを持っている が、計算コストの削減のために周方向の計算領域は 1.25 cm とし、電位、粒子ともに周方向 には周期境界条件を適用した. 粒子の軸方向の境界条件は流出境界で、イオン化による粒子 生成とホローカソードによる電子注入は先行研究を参考にしてモデル化した. 超粒子を用い て電子とイオンを計算空間内に配置し、数値ノイズを避けるために 500 万個程度と十分な数 の超粒子を用いた. また数値加熱を避けるため、十分にグリッド密度を高めてデバイ長スケ ールを解像した. それに加えて weighting 計算に用いる補間を 5 次とし、数値ノイズを低 減させた.

PIC 計算の結果,波状のプラズマ不安定構造が放電チャネル内部に出現した.電場分布よ り分散関係を調べたところ,理論値と概ね一致した事から ECDI が再現出来たと言える.こ のプラズマ不安定構造によって生ずる波状電場を抽出し,荷電粒子と電場との相互作用を無 視したテスト電子シミュレーションを行った所,静電波によって電子の軌道が乱され,電子 の分布関数が Maxwell 分布からシフトして非平衡分布となった.この際,ラーマー半径が小 さい低温度の電子がより静電波に捕縛され,ラーマー半径が大きい高温度の電子は静電波の 影響を受けず,静電波によってラーマー半径の小さい電子の軌道が乱された場合,それが電 子に対する衝突の様にあたかも振る舞う事で,電子の磁場による閉じ込めが弱くなる事が世 界で初めて示された.ラーマー半径と微細波状構造の波長とで無次元パラメータを作成し, その無次元パラメータを用いて整理する事で異常輸送現象を記述可能である事が示唆された. 3. 研究目標の達成状況

ホールスラスタの放電チャネルにおいて, ECDI 構造の発生を再現する事が出来ただけで なく,テスト粒子シミュレーションによってラーマー半径が小さい低温度の電子が静電波に 捕縛されて軌道が乱される事が示された.これによってあたかも粒子間衝突が生ずるかのよ うに電子が振る舞い,磁場中における異常輸送へと至る事が世界で初めて示され,研究目標 は達成出来たと言える.

4. まとめと今後の課題

スーパーコンピュータを用いた PIC シミュレーションにより,ホールスラスタにおける長 年の疑問であった不安定微細構造と異常輸送現象との関係性が明らかとなった. 今後は, PIC 計算で得た結果を再現可能なマクロスケールモデルを開発し,実際のホールスラスタ設計に活 用可能かを調査する予定である.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

[1] M. Takahashi: Journal of Physics: Conference Series, 2207 (2022), 012047.

[2] S. Suzuki, C. Kato, M. Takahashi, and N. Ohnishi: Journal of Physics: Conference Series, 2207 (2022), 012046.

[3] S. Suzuki, K. Hamasaki, C. Kato, M. Takahashi, and N. Ohnishi: Physics of Plasmas, 29 (2022), 093507.

[4] N. Tshunezawa, M. Takahashi, and N. Ohnishi: Proceedings of 37th International Electric Propulsion Conference, IEPC-2022-355 (2022).

著書

なし

国際学会

[1] N. Tshunezawa, M. Takahashi, and N. Ohnishi: Numerical Study of Plasma Transport Driven by the Wavy-microstructure in a Hall-effect Thruster, 37th International Electric Propulsion Conference, online, (2022), IEPC-2022-355.

国内学会・研究会等 なし
5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP02JUN22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.06 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月5日提出

回転同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置内の3次元電磁流体解析

高奈 秀匡 東北大学流体科学研究所 教授 長谷部 喬大 筑波大学理工情報生命学術院 M1 藤野 貴康

筑波大学システム情報系 准教授

小林 宏充

慶應義塾大学法学部物理学教室 教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

カーボンニュートラルを含む持続可能なエネルギー利用の実現に向け、風力発電の更なる 導入拡大が望まれている.その希望に応えるべく風力発電のコスト低減をもたらす風力エネ ルギーのより一層の高度利用技術の開発が期待されている.研究代表者は、風力発電機稼働 時の余剰風力エネルギーの回収を可能とする回転同軸二重円筒型 magnetohydrodynamic (MHD) エネルギー変換装置の機構を提案している.この変換装置は風車軸に直結され、装 置内部に充填した液体金属と外部磁場との相互作用(MHD 相互作用)によって生じるロー レンツ力により軸回転トルクを制御し、余剰風力時にも軸回転速度を定格速度に保つことを 狙う.それと同時にファラデーの電磁誘導の法則に基づき電気出力を得ることを狙う、画期 的な変換装置である.本変換装置は、風力発電のみならず、自動車の回生ブレーキなど、回 転機器へのさらなる応用の可能性を秘めている.

本研究では、実風車での実証試験を想定した大型の同軸円筒 MHD エネルギー変換装置の 設計指針を提示するために、回転同軸二重円筒型 MHD エネルギー変換装置内の電磁流体現 象の学理的理解を3次元電磁流体解析により深化することを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

磁場を印加した際に,負荷抵抗が短絡(short)条件,開放(open)条件での電流流線の振る舞いを調べ,その平均流速分布や乱流強度分布への影響を調べる.これにより,3次元計

算ならではの,流路内で発生する渦電流の影響を明らかにする.発電性能向上のためには, この渦電流を減らす運転条件の検討が必要となる.

- 2. 研究成果の内容
 - 2.1 共同研究の意義

本研究では、代表者が実験によって機構解明を行った MHD エネルギー変換装置内の電磁 流体現象を3次元数値解析によって明らかにする.当該分野の数値計算を専門とする教員と の共同研究を実施し、研究を進展させている.また、大学院生も参画することで研究教育の 両面からも本事業を推進している.

2.2 負荷条件による電磁流体現象の解明

外部接続する負荷抵抗が、内筒が回転する同軸二重円筒内の電磁流体場に及ぼす影響を検 討した.外部負荷抵抗が未接続の場合は、外部負荷抵抗値が無限大に相当し、Open 条件と 呼ぶ.一方、外部負荷抵抗値がゼロの場合を Short 条件と呼ぶことにする.

無次元化された印加磁束密度である Hartmann 数(以下, Ha と略)を増加させると, ロ ーレンツ力によって速度変動が減少し, 層流化していくことがわかった. 平均周方向流速は 層流化することに伴い, 層流における速度分布に近づいていく. Open 条件では, 外円筒近 くの速度がローレンツ力によって減少し, 速度がゼロに漸近していくが, 内円筒付近では, 層流化に伴い, 乱流拡散が減少し, 流速が増加していく. 一方, Short 条件では, 強いロー レンツ力により, 外円筒付近において逆流領域ができる. 内円筒付近の平均流速に関しては, Open 条件と異なり, Ha の増加による速度分布の変化は, ほとんどない.

これらの速度分布を理解するために, Ha=70, 100 における平均周方向速度と流線の r-z 平 面分布を検討した. Ha=70 に比べて Ha=100 では, 周方向速度が正の領域が内円筒付近に偏 っていた. そして, その領域にテイラー渦が閉じ込められていることがわかった. Open 条 件に比べて, Short 条件のほうが, ローレンツ力が強く作用するので, その領域が狭く, 結 果として, 内円筒付近の速度勾配があまり変化しない流れ場が実現している.

Ha=70,100におけるジュール加熱と電流流線のrz平面分布を検討した.Open条件では、 内円筒付近に電流流線が閉じた渦電流として存在することがわかった.これは内円筒,外円 筒へ電流が流れ込むことができないからである.また,電流の向きは、テイラー渦の向きと 一致している.内円筒に沿って電流が流れるが,z方向に印加された磁場と平行であるので、 ローレンツ力による速度の減速が起こらない.このため、Ha=70,100での速度上昇となった と考えられる.上下壁近傍,内円筒近傍,流路中央で電流流線の集中が見られ、その部分で ジュール加熱が大きくなっていることがわかった.一方,Short 条件では、内円筒から出た 電流が内円筒へと入り込む短絡電流が流れていることがわかった.Open条件では、内円筒 壁に沿った電流が流れるのに対して、Short条件では内円筒に垂直に電流が流れる点が異な る.結果として、Short条件では、内円筒近傍でもローレンツ力が大きく、図2における速 度増加に繋がらなかったと考えられる.内円筒から外円筒へ電流が流れる際は、速度が低い 上下壁近くの電流密度が大きくなる.これは、流路中央では強いローレンツ力によって、周 方向速度は逆流しているので、半径方向正の向きに流れる電流密度は小さくなるからである. 以上から、Short条件の場合は、上下壁全面の近傍でジュール加熱が大きくなることがわかった.

3. 研究目標の達成状況

3 次元 MHD 乱流計算の実装ができ,負荷の条件による電流の流れ方の違いを再現できるようになった.当初の研究目標は,かなり達成できている.

4. まとめと今後の課題

流体計算に適したスーパーコンピュータを利用することで,高速かつ多くの条件での結果が 得られ,研究が大いに進展した.今後は,負荷抵抗値を変化させて,発電効率やトルク制御の 有効性など,内部の電磁流体現象と積分量として出力される結果との相関関係を検討していく.

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

国際学会

Hiromichi Kobayashi, Ryo Sasaki, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: LES of MHD Turbulent Taylor-Couette Flow in Axial Magnetic Field, The 12th Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-12), (online) Osaka, Japan (2022).

Hiromichi Kobayashi, Hidemasa Takana, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino: Study on MHD phenomena in Co-axial Energy Conversion Device, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), Sendai, Japan (2022).

Hiromichi Kobayashi, Takahiro Hasebe, Takayasu Fujino, Hidemasa Takana: Large eddy simulation of Taylor-Couette flow in axial magnetic field, the 75th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Indianapolis, USA (2022).

国内学会・研究会等

長谷部喬大,佐々木亮,藤野貴康,高奈秀匡,小林宏充: 同軸二重円筒型 MHD エネルギ ー変換装置における発電実験と数値解析,電気学会 新エネルギー・環境研究会,仙台,(2022). 小林宏充,長谷部喬大,藤野貴康,高奈秀匡: MHD 相互作用下における Taylor-Couette 流れの 3 次元電磁流体現象,日本機械学会 第 100 期 流体工学部門講演会,熊本 (2022).

長谷部喬大,藤野貴康,高奈秀匡,小林宏充: MHD 相互作用下の回転同軸二重円筒流れ における乱流構造について,日本機械学会 関東支部 第 29 期総会・講演会,オンライン (2023).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CP03JUN22
研究種別	公募共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月24日提出

Dual-Phase 固体酸化物電解質膜内の粒界と酸素イオン伝導特性の相関関係の解明 徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

Jeongmin Ahn

Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Syracuse University 准教授

永島 浩樹

琉球大学工学部 助教

Alexander Ryan Hartwell

Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Syracuse University 助教

伊地知 卓己

東北大学工学研究科 ファインメカニクス専攻

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固体酸化物型燃料電池は高い発電効率を有する一方で,非常に高温な作動温度による電解 質膜の劣化促進が問題となっている.そのため発電効率を維持しつつ,作動温度の低減が必 要とされている.膜の特性には酸素イオンおよび電子の伝導特性が重要であり,これを高め るために二種類の異なる構造,特性を有する固体酸化物を組み合わせた Dual-Phase 固体酸 化物膜の利用が注目されている.さらに膜構造のナノ薄膜化やナノ結晶化による伝導特性の 向上も期待されている.一方で,Dual-Phase 固体酸化物膜内では異なる構造の結晶間に粒界 (grain boundary : GB)が存在し,ナノ薄膜化やナノ結晶化によって GB の影響は相対的に増 加する.このため Dual-Phase 固体酸化物膜内の GB や結晶サイズがイオン伝導性に与える 影響を把握する必要がある.本研究では、ペロブスカイト構造を有する SrSc_{0.1}Co_{0.9}O_{3.6} (SSC) 酸化物とフルオライト構造を有する Sm_{0.2}Ce_{0.8}O_{2.6} (SDC)酸化物から成る Dual-Phase 固体酸化 物膜を対象とし、その膜内の GB と酸素イオン伝導メカニズムを明らかにすることを目的と している.

1.2 研究期間内の最終目標

期間内の最終目標のは分子動力学(molecular dynamics: MD)法により Dual-Phase 酸化物膜内の GB が酸素イオン伝導特性に与える影響を明らかにし、知見を得ることである. さらに実験により薄膜の作成方法を構築し、Dual-Phase 固体酸化物膜のイオン伝導特性を 把握することである.

研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 本研究は東北大学,球大学におけるシミュレーションとシラキュース大学における実験の
 両方の観点から Dual-Phase 固体酸化物膜内の酸素イオン伝導性の解析を行うことができる

高力の観点から Dual Thase 固体酸化物使内の酸素イオクム等性の麻酔を行うことができる 点が共同研究の意義である.実験によりシミュレーションの妥当性を担保できるだけでなく、 実験結果から得られた電解質膜の特性についてシミュレーションによりそのメカニズムを解 明することが可能である。本研究では、まず SSC 酸化物と SDC 酸化物で構成される Dual-Phase 固体酸化物膜について MD 法による解析を行った。膜内の平均二乗変位から拡散係数 を算出し、GB の影響による酸素イオン伝導特性について解析した。GB から一定の距離を表 す DGB(distance of grain boundary)を変化させ、DGB 内外での酸素イオン拡散性を解析した。 その結果、GB の存在する方向への拡散性と DGB の内部において酸素イオン拡散性が大きく 低下していることが分かった。さらに実験による解析では、NiO と(Y₂O₃)_{0.08}(ZrO₂)_{0.92}から構成 される基盤をテープキャスティング法により作製し、焼結中に生じる異なる材料間の湾曲現 象について解析を行った。その結果,経験的に得られた熱膨張係数を用いて、Dual-Phase 材 料の曲率を予測することが可能となった.

3. 研究目標の達成状況

MD 法による解析により, Dual-Phase 固体酸化物膜内の粒界が酸素イオン伝導特性に及ぼ す影響を明らかにした.また,実験による解析では, NiO と $(Y_2O_3)_{0.08}(ZrO_2)_{0.92}$ から構成される 基盤の焼結時湾曲現象について解析を行い,その曲率を予測した.

4. まとめと今後の課題

本研究では Dual-Phase 固体酸化物膜について解析を行った. 膜内部の酸素イオン伝導特性 を MD 法により解析し,実験により成膜技術を構築した. MD 法による解析では,DGB 内外 で MSD を計算し,GB がイオン伝導性に与える影響を明らかにした.実験による解析では, 焼結時における材料の曲率を熱膨張係数に基づき予測することに成功した.今後は動的モン テカルロ(kinetic Monte Carlo: kMC)法を用いた酸素イオン伝導性の解析を行う予定である. 具体的には MD 法より得られた活性化エネルギー等の情報をもとに,kMC 法を用いて GB の 空間的分布がイオン伝導性に与える影響について解析を行う.kMC 法を用いることで MD 法 よりも大きい時間,空間スケールでの解析が可能となる.

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Alexander R. Hartwell, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, "Oxygen Ion Condiction Property of Solid Oxide Menbrane Based on Multi-Scale Analysis", ECS Transactions, 111 (6) 1597-1602 (2023).
- Hiroki Nagashima, Ryan Falkenstein-Smith, Jeongmin Ahn, and Takashi Tokumasu, "Molecular dynamic study of oxygen ion diffusion and grain boundary in SrSc_{0.1}Co_{0.9}O₃₋₆ perovskite solid oxide membrane", Solid State Ionics 399 (2023),

116291.

著書

なし.

国際学会

- 1. H. Nagashima, T. Ijichi, J. Ahn, and T. Tokumasu "Correlation between oxygen ion conductivity and GBs in solid oxide electrolyte membrane", Eighteenth International Conference on Flow Dynamics, CRF-23, 2021.
- Takumi Ijichi, Hiroki Nagashima, Alexander R. Hartwell, Jeongmin Ahn, Takashi Tokumasu, "Oxygen Ion Condiction Property of Solid Oxide Menbrane Based on Multi-Scale Analysis", the 243rd ECS Meeting with SOFC-XVIII, SOFC-0247, May-June 2023, Boston, MA.

国内学会・研究会等

なし.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし.

I.研究成果概要

共同研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL02APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年06月09日提出

対称反射壁を用いたクアッドロータ機の地面効果の評価

大塚 光,得竹 浩

金沢大学理工研究域フロンティア工学系 助教,教授

永井 大樹

東北大学流体科学研究所 教授

原 大生

金沢大学理工学域フロンティア工学類 学部4年

伊神 翼, 西村 練

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 博士2年,修士1年

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

複数の回転翼を持つ小型マルチロータ機は、ロータ推力が地面近傍で地面効果によって、 地面からの高さに応じて変動する.これまでの実験から、1つの独立したロータと異なり、 マルチロータ機のロータ推力は、地面との距離に対して単調に変化しないことが分かってい る.推力が地面との距離に対して単調に変化しないことで、軽い機体は着陸時に機体の高さ 位置が振動しやすく、着陸時に転倒するリスクが有る.そのため、離着陸時の推力制御や、 地面効果を抑制する手法を検討するために、マルチロータ機の地面効果時の流れ場と推力変 動メカニズムの解明が求められる.

複雑な流れ場の理解には、数値流体力学(CFD)解析が有効であるが、マルチロータ機周り 流れの解析は複数のロータを解析するため計算コストが大きく、計算コストを低減する必要 がある.そこで、一つのロータに対して対称な壁面を設けて、マルチロータ機を模擬し、解 析領域を省略することが考えられる.実際の流れ場は厳密には対称ではないが、空気力に与 える影響の程度によっては、解析の妥当性を保ちつつ計算コストを削減することができる.

そこで本研究では、クアッドロータ機を対象に、実験と CFD 解析によって、4つのロータ を配置した場合と、1つのロータと対称面に摩擦なし壁面を設けてクアッドロータ機を模擬 した場合での地面効果の差異を比較する.比較に基づいて、本解析手法の妥当性を評価する ことを研究目的とする. 1.2 研究期間内の最終目標

2022 年度内の目標は主に以下の3つで、地面効果中を受けるクアッドロータ機について、対称な解析領域の省略が可能か結論づけることを目標とした.

- a. 解析ソルバー操作の習熟
- b. 解析に必要な計算量の把握
- c. 全機と 1/4 計算領域モデルとの流れ場比較

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください) [研究成果の意義]

CFD 解析を行うことで、可視化実験では把握が難しかったクアッドロータ機後流の詳細な 流れ場構造と速度分布を把握した.クアッドロータ機の地面効果について、ロータ推力変動 の傾向がシングルロータと異なる理由を探る検討材料を得た.

全機モデルと計算領域省略モデルについて解析を行ったところ,全機モデルの方が,機体 中央部分で生じる噴流が機体中心に対して非対称に揺らぎ,よりロータを通過する流れを加 速させていることが分かった.機体がないロータだけの状態ではあるが,計算領域の省略の 有無が噴流の形成状態に影響するため,対称性に基づいた解析領域の省略は,地面効果解析 に適さないと考えられる.

[研究成果の内容]

a. 解析ソルバー操作の習熟

2022 年度から利用を開始し、スーパーコンピュータでの解析操作に習熟した. Pointwise による格子生成操作、rFlow3Dの操作を理解し解析の準備を完了した.

b. 解析に必要な計算量の把握

地面効果解析の計算格子は、ロータ高さ変更に対応させつつ後流領域の解像が必要であ るため、地面効果がない場合よりも格子点数が必要であった.解析に用いている格子点数の 合計は 3700 万点である.地面効果は流れ場が成長するまで解析する必要があるため、先行研 究に習い 40 回転分の計算を行っている.全機モデルの場合、1 ノード 40 コアで 1 回転分の 計算に 16h を要する.単純計算で 1 ケース 640 ノード時間が必要になるため、ステップごと の回転角度の調整と、収束の様子を確認しつつ解析に必要な回転数を削減する必要がある.

c. 計算領域の省略の有無による流れ場比較

全機モデルと省略モデル 20 回転時点での解析結果を比較したところ,機体中央部分に生じ る噴流の状態が異なった.全機モデルの方が噴流に非対称性が有り,回転位相によって形状 がゆらぎながら,ロータ推力がより小さくなっていた.

このことから,地面効果を議論するために4つのロータの回転位相によって変化する噴流 の状態を模擬する必要があり,計算領域の省略が適切でないと考えられる.一方で,回転位 相に地面効果の推力変動が依存するのであれば,4枚のロータの位相に対して地面効果の影 響が異なることが懸念される.この課題は先行研究でも指摘されており,地面効果のCFD解 析結果に影響を把握する必要がある. 3. 研究目標の達成状況

全機モデルと 1/4 モデルの間で解析結果を比較した結果,解析領域の省略によって,地面効果によるロータ推力が異なることが分かった.よって,地面効果の CFD 解析では,対象領域の 削減は適切ではないと考えられる.

一方で,解析によりこれまで実験で明らかにできていなかった,地面効果時の詳細な後流 構造を把握することができた.

4. まとめと今後の課題

全機モデル解析の必要性を確認し、形成される噴流を模擬する程度によって、ロータ推力が 変動することが示唆された. 噴流の形成には回転位相が影響すると考えられ、地面効果を CFD 解析で取り扱う際に及ぼす影響を評価することが望ましい.

今後,クアッドロータ機が地面効果を受けた時の推力変動メカニズムの解明に向けて,ロー タ間隔,ロータ高さ,回転位相をパラメータとして後流構造変化を分析する

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

無し

著書

無し

国際学会

Taisei Hara, Hikaru Otsuka, Hiroshi Tokutake, Hiroki Nagai, "Preliminary Study on Quadrotor Wake in Ground Effect Using Symmetry Walls," 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information, Sendai, Japan, 2022.

国内学会・研究会等 無し

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 無し

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL04APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

弾性体の流体起因自励振動を利用した

クリーンエネルギー発電技術の研究

寺島 修

富山県立大学 工学部 機械システム工学科 准教授

永井 大樹

東北大学 流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

2050年のカーボンオフセットや SDGs の達成に向け, CO2 排出量の削減とクリーンエネル ギー創成技術の高度化が求められている.この達成に向け,化石燃料の代替エネルギーや化 石燃料を使用しない発電技術の研究などが進められている.一方,産業,社会,生活におけ る,消費エネルギーの削減に寄与する基盤技術の高度化も求められている.理由としては, 我々が産業,社会,生活で使用するエネルギーの低減も必要不可欠であるためである.

このような背景の下,本研究では省エネルギー化の技術の一つである,環境発電(エナジー ハーベスティング, Energy Harvesting)の研究を行った.環境発電は,再生可能エネルギーと してよく知られているソーラー発電や水力発電のような大規模な発電を目的とするものでは なく,本来であれば捨てられてしまう排熱,排風,振動などを有効に利用して発電し,使わ れた電力を回収して再利用することで,消費エネルギーの低減への貢献を目指すものである.

この一例として, 排風などの気流中に発電用の PVDF を設置し, これに流体起因自励振動 を発生させることによる発電が行われている(1). この理由として, 流体起因自励振動はわず かな外力で大きな振動変位を生じることができるため, 効果的に発電をすることができると 考えられるためである.一方, この発電手法の検討は十分にされておらず, 排風の流速に対 する発電量の依存性や, 発電を効果的に起こすための条件, 発電時の PVDF の振動状態やそ の周囲の流れの様子, 発電に適した PVDF の形状などは見出されていない.

そこで本研究では、我々の研究グループで行った一様流中における薄膜体の振動に関する 研究成果も活用しながら上記の点について明らかにすることを目指した. 1.2 研究期間内の最終目標

PVDF によるエナジーハーベスティングの実現可能性を検討し、それを行う際に最適な 条件を見出すことを最終目標とする。

2. 研究成果の内容

本共同研究を通じて,一様流中で大変形を伴い振動する物体周りの流れの様子や物体の振 動の様子を解析する手法を構築する。これは,東北大学流体科学研究所が有する流体解析・ 実験環境を活用することで実現できるため,これが本共同研究実施の意義である。

2.1 一様流中の PVDF で発生する電流の計測結果と振動の様子

図 1(a)にコイルを接続せずに計測した PVDF から発生する電圧と風洞の吹き出し口の流速の関係を示し、図 1(b)に抵抗 4 Ω のコイルを接続して計測した PVDF から発生する電流と吹き出し口の流速の関係を示す. 図 1(a)の横軸は流速,縦軸は電圧のパワースペクトル密度 (Power Spectral Density, PSD),図 1(b)の横軸は流速,縦軸は電流の PSD を表す.

図 1(a)と(b)より, PVDF で発生する,一定時間における電圧や電流の発生量は 6.0 m/s の時 に最大となることが明らかとなった.よってコイルの接続有無による回路構成の差異から若 干の違いはあるが, 6.0 m/s が電圧や電流を高めるために適した流速であった.

図2に流速が6.0 m/sと12.0 m/sのときのPVDFの様子をそれぞれ示す.発生電圧は流速が6.0 m/s(左図)のときに最大となり,流速が12.0 m/s(右図)のときに小さくなる.図2はPVDFの斜視図である.図2左図より,発電量が大きくなる時はPVDFがスパン方向(幅方向)に同位相で,二次元的に振動し,薄膜の振動モードの一つである second nodes mode に近い状態となった.一方,図2右図より,発電量が小さくなる時はPVDFにしわがよるなど,各部位の振動の位相に差異があり,三次元的な振動となっていた.流速によるこのような振動の差異により,発電量の差異がもたらされたものと考えられる.



Fig. 1 Relation between the flow velocity and (a) generated voltage and (b) electric current (PSD, Maximum value)



Fig. 2 Photographs of the PVDF in a free stream when flow velocity U_{∞} is 6.0 m/s (left) and 12.0 m/s (right).

2.2 振動する PVDF の後流の可視化

後流の可視化を流体-構造-振動連成解析と PIV 解析により行った結果, PVDF 下流端付近の 強い上昇流または下降流が大きな振動を引き起こしていることが明らかとなった. この特徴 的な流れは,流速が 6.0 m/s のときに,より明確に,周期的に発生する. さらに,後流におい て正負の速度変動が強い領域は,流速が 12.0 m/s の場合よりも 6.0 m/s の場合の方が大きい. したがって,このような PVDF の後流に存在する特徴的な構造が大きく明瞭になると, PVDF のスパン方向の 2 次元振動が顕著になり,発生する電圧,電流が増加することが明らかとな った.

3. 研究目標の達成状況

PVDF を用いたエナジーハーベスティングには実現可能性があり、最適な形状・流速の下 にこれを行うことで、効率的なエナジーハーベスティングが実現できると考えられる。

4. まとめと今後の課題

当初の目標を達成できたため、本共同研究は 2023 年度で終了する。これらの成果をまと めた英文学術論文が 2023 年 8 月に発行予定である。

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

On the energy harvesting technique using a fluttering PVDF film with flow-induced vibration Naoyuki TAKEDA, Koki SHIGE, Osamu TERASHIMA, Tsubasa IKAMI, Hiroki NAGAI, Yasufumi KONISHI, Toshihiko KOMATSUZAKI

Advanced Experimental Mechanics, Vol. 8, (2023).

国際学会

Clean Energy Power Generation Using Flow-induced Self-excited Vibration of an Elastic Body Koki Shige, Naoyuki Takeda, Miyu Okuno, Tsubasa Ikami, Tatsuya Kobayashi, Osamu Terashima, Yasufumi Konishi, Hiroki Nagai, Toshihiko Komatsuzaki

Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information (2022), CFR 1.

国内学会・研究会等

武田尚恭, 重昂輝, 伊神翼, 小林達矢, 寺島修, 永井大樹, 小西康郁: PVDF と流体起因振動を 活用したエナジーハーベスティングに関する研究, 日本機械学会北陸信越支部 2023 年合同 講演会, (2023), 講演番号 D008.

武田尚恭, 重昂輝, 伊神翼, 小林達矢, 寺島修, 永井大樹, 小西康郁: 流体起因自励振動を活 用したエナジーハーベスティングに関する研究, 日本機械学会北陸信越支部 2023 年合同講 演会 卒業研究セッション, (2023), ポスター番号 P211.

武田尚恭,重昂輝,林和樹,寺島修,永井大樹,小西康郁,伊神翼,小松崎俊彦,発電用薄膜の振動と後流の可視化による発電効率向上手法の検討,日本実験力学会 2023 年度年次講 演会 (2023).

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし
書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL06APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月12日提出

非普遍的な乱流場における乱流エネルギ・スカラ輸送機構に

関する基礎研究

伊藤靖仁,岩野耕治,長田孝二,渡邊智昭 名古屋大学大学院工学研究科 教授,助教,教授,准教授

Yi Zhou

南京理工大学 研究員

酒井康彦

名古屋産業科学研究所 研究員

服部裕司

東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

近年,完全発達乱流を基にした理論やスケーリング法則が適用できない非普遍的な乱流場に 関する研究が盛んにおこなわれている.本研究グループでは昨年度まで「乱流・非乱流共存 流動場における流動構造とエネルギ・スカラ輸送機構」というテーマで研究を行ってきた. その結果,そのような流れ場では通常の乱流が有する普遍的性質を有さない乱流の存在を明 らかにしてきた.しかし統計解析は行われたものの,その物理現象的解釈やスカラ輸送機構 の詳細までは解明されていない.そこで本研究では,格子乱流場や自由せん断乱流場,圧縮 性流体に対する数値シミュレーションを行い基礎特性を取得するとともにその特徴構造を見 出すことを目的とする.また減衰乱流における平衡性やエネルギとスカラの相似性にも着目 し,普遍的性質が見られる完全乱流との相違を明らかにする.これにより乱流力学の深化お よび既存の乱流モデリングの修正および発展を目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

非普遍的な乱流場における乱流エネルギ・スカラ輸送機構を明らかにする.具体的にはレイ ノルズ数が低い格子乱流場や完結的な流れ場である物体後流流れや自由せん断乱流場,また 圧縮性流体を対象とする.さらに得られた知見をもとに,既存の乱流モデリングの修正およ び発展を目指す.

2. 研究成果の内容

本研究の目的を達成するためには、得られるデータに限界がある実験研究や乱流モデルを用いた数値シミュレーションではなく、モデルを使わない直接数値計算(Direct numerical simulation: DNS)による流れ場の再現が必要不可欠である。しかしそのためには通常のワークステーションなどでは現実的ではない大規模かつ高速なコンピュータが必要とある。そこで本研究を東北大学流体科学研究所と共同で実施し、同研究所のスーパーコンピュータを利用して流体シミュレーションを実行した。本報告では、格子乱流場におけるスカラ輸送に関して得られた結果について述べる。

2.1 計算手法

図1に計算領域の概略図を示す.格子間隔*M*に対して,主流方向長さが32*M*,鉛直およびスパン方向長さが6*M*であり,乱流格子が流入部から2*M*の位置に設置されている.格子間隔と 主流方向速度に基づくレイノルズ数 Reは5000および9000とした.ただし以下の内容におい てレイノルズ数の影響はほとんど見られなかったことから,本報告では Re=5000の場合の みの結果を示す.パッシブスカラの濃度を計算領域の上層でC=1.0,下層でC=0として流入 させた.



2.2 計算結果

図2に、主流方向位置 x/M=10,15,20,25 の中心軸上における Scale-by-scale for scalar (SBSS) 方程 式の各項の収支を示す.詳細は省略するが、青色で示された非線形輸送項が上流の二点間距離 rが大きな領域で負の値を取る、すなわち逆カスケードのような挙動を示すことがわかる.さ らなる解析を行った結果、この現象に寄与するのは非線形輸送項を構成する要素の一つである

 $-\delta v \delta c \left(\frac{\partial c r}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial y} \right)$ であることが明らかになった.ただし δv および δc は二点間の変動速度差また

は濃度差, cおよびc'は, 各点での変動濃度である.この項は三つの項で構成されるため, 符号 の正負は各項の正負の組み合わせで決定される.そこで各符号の組み合わせにおける条件付き 平均を求め逆カスケード現象を引き起こす条件を見出し, その場合における濃度分布を同定し た.その結果の一例を図3および図4に示す.図より, 順カスケードを示す

$$(\delta v, \delta c, (\frac{\partial c'}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial y}) = (-, +, -)$$
の組み合わせの場合には、条件付けした点において濃度勾配が平

均濃度勾配と同じであるのに対して,逆カスケードを示す(
$$\delta v, \delta c, \left(\frac{\partial c'}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial y}\right)$$
) = (-,+,-)の場合

には条件付けした点における濃度勾配が平均濃度勾配と逆の傾向を示すことことがわかる.こ れはスカラ拡散の比較的初期段階において,周囲流体との混合が進まない状態で元の濃度を保 ったまま大きく鉛直方向に輸送されたことを意味する.つまり,統計的にスカラの逆カスケー ド現象がみられる原因は,予混合がない状態で物質が乱流場に供給された場合にみられるとい える.



図2:SBSS 方程式の各項の収支.



図3:条件付き平均濃度分布の鉛直方向分布(
$$\delta v, \delta c, \left(\frac{\partial c'}{\partial y} + \frac{\partial c}{\partial y}\right) = (-,+,-)$$



図4:条件付き平均濃度分布の鉛直方向分布($\delta v, \delta c, \left(\frac{\partial c'}{\partial v} + \frac{\partial c}{\partial v}\right) = (+, -, +)$

3. 研究目標の達成状況

プロジェクトの2年目である本年度は、格子乱流場におけるスカラ輸送機構を明らかにす るとともに、1年目に明らかにした乱流エネルギの輸送機構との挙動および物理的メカニズム の違いを明らかにした.非一様等方性乱流場であるせん断乱流場他の流れ場に対しても研究を 進めており、おおむね順調に進捗したと言える.

なお、上記の内容は Physics of Fluids に受理され、2022 年 5 月号に発行された.また、平 行棒下流流れにおける研究においても一報が Physics of Fluids にて 4 月号に掲載された.

4. まとめと今後の課題

本年度の研究から、平均速度こう配を伴わない場であるや平行棒後流における流れの詳細 を明らかにした.最終年度である次年度は、平均速度こう配を伴う流れ場である混合層流や 衝撃波を伴う場に対する考察も行い、非普遍的な統計的性質を有する様々な流れ場の基礎特 性の解明を行う.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

 M. Wang, Y. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, Y. Ito, Y. Zhou, Y. Hattori, Interscale transport of turbulent energy in grid-generated turbulence with low Reynolds numbers, Int. J. Heat Fluid Flow 97 (2022), 109031.

https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2022.109031

国際学会

[1] Y. Zhou, Y. Ito, K. Nagata, T. Watanabe, K. Iwano, T. Hattori, Y. Sakai, Turbulent energy transport in wakes behind bars and grids, *Proc. of the 21st International*

Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2021), Sendai

- [2] M. Wang, Y. Ito, T. Okawa, K. Iwano, Y. Sakai, Numerical Investigation about Inverse Cascade Phenomenon in Mixing Layer, Proc. of the 18th International Conference on Flow Dynamics (ICFD-2021), オンライン, (2021), No. OS15-7/4 pages.
- [3] M. Wang, Y. Ito, Y. Zhou, K. Nagata, T. Watanabe, K. Iwano, Y. Sakai, Y. Hattori, Transport and dissipation mechanism of turbulent energy and scalar in wakes behind bars and grids, *Proc. of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information*, (2022), pp. 161-162.
- [4] M. Wang, T. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, Y. Ito, Inter-scale transfer of passive scalar in grid turbulence, Proc. of the 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (2022), No.201.
- [5] Y. Zhou, Multi-Scale Characteristics of Wake Growth and the corresponding Interaction Mechanisms, Conference for the Major Research Program on the Creation, Evolution, and Mechanisms of Turbulent Structures (2022)

国内学会・研究会等

- [1] M. Wang, Y. Ito, Y. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, The relation between dissipation and the scale-by-scale transport in grid-generated turbulence, 2021 年度日本機械学会年次大会, オンライン, (2021), No. S055-22.
- [2] 汪 沐陽, 百合草 拓哉, 岩野 耕治, 酒井 康彦, 伊藤 靖仁, 格子乱流でのスカラの逆カス ケード方向の輸送現象に関する研究, 日本流体力学会年会 2021, オンライン, (2021), No. 507.
- [3] 汪 沐陽, 大川 拓己, 岩野 耕治, 酒井 康彦, 伊藤 靖仁, 乱流混合層におけるエネルギお よびスカラの渦スケール間輸送機構の解明, 第 35 回数値流体力学シンポジウム, オンライ ン, (2021), No. A09-3.
- [4] 汪 沐陽, 百合草 拓哉, 岩野 耕治, 酒井 康彦, 伊藤 靖仁, 平均スカラー勾配を伴う流れ 場におけるスカラーカスケード機構, 第36回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2022), No.A10-2.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL09APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月30日提出

液体・ソフトマター・界面の分子熱輸送

小原 拓, Donatas Surblys

東北大学流体科学研究所 准教授,助教

川越 吉晃

東北大学大学院工学研究科 助教

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

熱伝導率などバルク液体・ソフトマターの輸送物性や固液界面の熱コンダクタンスなど界 面の輸送物性は、デバイス内の熱輸送や発熱体からの放熱などに直結する工学的に重要な特 性である。特に近年では、電気自動車のインバータなど高密度の発熱を伴うパワーモジュー ルから速やかに熱エネルギーを除去するなど、高度な要求に応える技術が求められており、 大きな課題となっている。一般に液体・ソフトマターの輸送特性は、分子間・分子内の複雑 な力学的干渉の結果として発現するが、分子スケールの輸送メカニズムに介入して上述の技 術課題を解決しようとする工学的なアプローチは確立されていない。本研究は、単純な分子 系を用いた基礎的検討から出発して複雑な実用的化学物質の適用による応用に至るまで、大 規模かつ系統的な分子動力学シミュレーションにより、基礎現象のメカニズム解明と技術的 課題の解決を図ろうとするもので、対応する実験も含めた大規模なプロジェクトの基幹部分 となるものである。

1.2 研究期間内の最終目標

(a)液体・ソフトマターの熱伝導率の決定メカニズム、(b)固液界面熱抵抗の発現メカニズム、 (c)固体表面微細構造の影響、(d)界面活性物質吸着の影響、(e)ソフトマターTIM(熱界面材料) の効果、などを解析の対象として、これらの特性を解明し、界面熱現象を所望の特性に設計 するための方策を確立する。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

(1) Dry-surface 法による固液界面付着仕事の計算法

近年開発された Dry-surface 法では、固液界面の付着仕事の計算に熱力学積分を使用して いるが、長距離のクーロン相互作用が界面に存在する場合、通常の分子動力学ソフトウェア には実装されていない追加のポアソン方程式を解くなど、特別な処理が必要となる。本研究 では、長距離クーロン相互作用を減衰クーロン相互作用で置き換え、いくつかの熱力学積分 経路を調べた。経路が可逆であれば、統合の経路にかかわらず同じ付着仕事の値が得られる が、数値的効率は大きく異なること、減衰率の単純なスケーリングが最も効率的である一方、 クーロン減衰パラメータを変更する方法が最も効率が悪いこと、長距離のクーロン相互作用 を減衰クーロン相互作用に置き換えると、固液界面で液体分子の配向がわずかに変化するこ とにより、付着仕事が 10 mJ/m²程度高くなること、付着仕事を van der Waals 成分とクー ロン成分に分割すると、積分経路によって値が大きく異なること、などが明らかとなった。

(2) 剛体分子の原子運動自由度と温度計測への影響

分子動力学シミュレーションでは、原子またはサブÅの分解能で正確な温度分布を計算す るのは非常に一般的であるが、そのために必要な個々の原子の自由度(DOF)は、剛体など 幾何学的制約のある分子の場合、一般的に定義されていない。従来、一つの距離の拘束ごと に原子の自由度を 1/2 ずつ減らす近似が使用されてきたが、この近似は空間的に均質な系に のみ適用可能である。本研究では、統計力学に基づいて、完全または部分的に剛体の分子中 の原子の自由度に対するより一般的な式を導出した。これらの式により、平衡状態ではすべ ての制約された原子が全体の系の平衡温度と同じ温度を示し、界面など非均質な系にも適用 可能となった。

2.2 新しい現象の解明

(1) 固液界面の一次元調和鎖モデル

固液界面における界面熱輸送の原子レベルのメカニズムについて、最近の分子動力学の研 究により、固体と界面活性剤溶液の間の界面熱抵抗は、界面活性剤の分子量の調節により最 小限に抑えられることが著者らにより示されている。本研究では、界面吸着層を持つ固液界 面の一次元調和鎖モデルを用いて、振動モードのマッチングを考慮して、この界面熱抵抗の 最小化のメカニズムを解明した。一次元鎖の運動方程式を古典的なランジュバン方程式によ って記述し、非平衡グリーン関数(NEGF)法によって解析解を得た。得られた界面熱抵抗 は振動のマッチングとして表現され、その振動密度状態の重なりとの関係も議論した。この 解析により、ランジュバン方程式中の減衰係数は有限かつ十分に大きな値であるべきで、固 液界面における振動モードの速い減衰を表現するために必要であることが結論づけられ、従 来の NEGF-フォノン伝達モデルを固体-固体界面の熱輸送から固液界面に無理なく拡張する 手がかりを得た。

(2) シリカー有機液体の固液界面熱抵抗を支配するメカニズム

分子動力学法を用いて、5 つの異なるシリカ表面と 2 つの有機液体の間の界面における熱 輸送を解析した。有機液体としてトリアコンタンとトリアコンタノールを選択したが、これ らの分子は同種分子あるいはシリカ表面分子との間に水素結合を持つか持たないかの違いが ある。シリカ表面にシラノールがある場合、振動のマッチングにより、トリアコンタン/ト リアコンタノールとの間で熱伝導特性が向上する。シリカ表面でシラノールの面積密度を増 大させると、シリカートリアコンタノール系の界面熱輸送は向上する一方、シリカートリア コンタン系はほとんど変化しない。これはトリアコンタンが水素結合を持たないことによる ものである。ただし、シリカートリアコンタノール系でも、界面熱輸送の向上がシラノール の面積密度に比例しないことがある。これは、シラノールートリアコンタノールとシラノー ルーシラノールの水素結合が競合しているためである。この他、温度や界面に吸着したトリ アコンタノールの配向が現象に及ぼす影響が明らかとなった。

3. 研究目標の達成状況

研究目標を達成し、物理化学・熱科学分野の主要誌に研究成果を発表した。

4. まとめと今後の課題

この他、固体表面の凹凸が液体分子の吸着や固液界面熱抵抗に及ぼす影響、多糖類による 潜熱蓄熱材の性能評価とメカニズム解明、カーボンナノ材料の懸濁による有機液体の有効熱 伝導率向上などの研究を進めている。

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文

学術雑誌(解説等を含む)

Gaoyang Li, Yuting Guo, Takuya Mabuchi, Donatas Surblys, Taku Ohara and Takashi Tokumasu: Prediction of the adsorption properties of liquid at solid surfaces with molecular scale surface roughness via encoding-decoding convolutional neural networks, Journal of Molecular Liquids, Vol. 349 (2022), 118489, DOI:10.1016/j.molliq.2022.118489.

Gaoyang Li, Yuting Guo, Takuya Mabuchi, Donatas Surblys, Taku Ohara, Takashi Tokumasu: Prediction of nanoscale thermal transport and adsorption of liquid containing surfactant at solid-liquid interface via deep learning, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 613 (2022), pp. 587–596, DOI: 10.1016/j.molliq.2021.118363.

Donatas Surblys, Florian Muller-Plathe, and Taku Ohara: Computing the work of solid-liquid adhesion in systems with damped coulomb interactions via molecular dynamics: approaches and insights, Journal of Physical Chemistry A, Vol. 126 (2022), pp. 5506-5516, DOI: 10.1021/acs.jpca.2c03934.

Tsuyoshi Ito, Hiroki Matsubara, Donatas Surblys, and Taku Ohara: Molecular dynamics study on the thermal conductivity of a single polyethylene chain: Strain dependence and potential models' effect, AIP Advances, Vol. 12 (2022), 105223, DOI: /10.1063/5.0095975.

Hiroki Matsubara, Donatas Surblys, and Taku Ohara: One-dimensional harmonic chain model of vibration-mode matching in solid-liquid interfacial thermal transport, Physical Review E, Vol. 107 (2023), 024103, DOI: 10.1103/PhysRevE.107.024103.

Haiyi Sun, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, and Taku Ohara: Molecular dynamics

study on the role of hydrogen bonds and interfacial heat transfer between diverse silica surfaces and organic liquids, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 208 (2023), 124091, DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124091.

Hiroki Matsubara, Donatas Surblys, and Taku Ohara: Degrees of freedom of atoms in a rigid molecule for local temperature calculation in molecular dynamics simulation, Molecular Simulation, 2023, in print, DOI: 10.1080/08927022.2023.2232466.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL10APR22
研究種別	共同研究
利用期間	2022/04 ~2023/03
報告回数	第1回報告

2023年2月28日提出

飛行する回転中空円筒の実験と数値解析の発展

Experimental and Simulation development of a Rotating Hollow Cylinder in Flight

平田 勝哉*†,石本 淳**†† 中野 政身***,田中 大貴*,小口晃太郎* *同志社大学理工学部,**東北大学流体科学研究所 ***東北大学未来科学技術共同研究センター †申請者, ††所内対応教員または所外対応研究者

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

一般に、高レイノルズ数における三次元物体を過ぎる流れは航空力学や機械工学、スポーツ などのさまざまな分野で重要であるが、二次元物体と比較すると研究も少なく、不明な点も 多い.3 次元物体の基本構造としては球や円板などの軸対称物体が挙げられる.ここではパ イプを取り上げ、さらに回転している状態を考える.

目的としては、回転しながら飛行するパイプの飛行メカニズムを空気力学的な観点から明ら かにすることを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

射出装置による精密な投擲を行い、より詳細なモデルの軌道・姿勢を得る.数値解析では実験と同様の条件で3次元シミュレーションを行い、モデル周囲の詳細な流れを得る.

- 2. 研究成果の内容
 - 2.1 モデルに作用する空力特性の解明

射出装置を完成させた.この装置を用いて実験を行うことで,広い迎角範囲での多数の実験 データを得ることが出来た.そしてそれらのデータを運動解析することで,モデルに作用す る揚力,抗力,空力モーメントと迎角,角速度との関係性を解明した.

2.2 数値解析によるモデル周囲の詳細な流れの解析

数値解析では実験と異なる条件で3次元シミュレーションを行い、結果より得られたプログ

ラムの問題点についての改善を行った.

3. 研究目標の達成状況

射出装置を使用することで、広い迎角範囲での多くの飛行データをとることが出来た.これら のデータを運動解析することで、モデルに作用する流体力(揚力/抗力)、モーメントを算出し、 流体力やモーメントがモデルの軌道にどう影響しているかを確認できた.数値解析において はプログラムコードのミスを発見し、改善を行った.

4. まとめと今後の課題

本年度の活動で、広い迎角の範囲で、より精密、詳細な飛行パイプに働く流体力やモーメント を得ることが出来、それらがパイプの軌道にどう影響しているかを確認できた.数値解析にお いては観測実験とパラメータを合わせたシミュレーションを行い、いくつかコードにミスをみ つけて改善を行った.現在結果が出ているのは一例のみであるため、今後さまざまなパラメー タで数値解析を行い、計算することが望まれる.今後、異なる形状のパイプを作成し、形状効 果における空力特性について調査する予定である.

- 5. 研究成果(*は別刷あり)
- 学術雑誌(査読つき国際会議, 解説等を含む) なし

2) 国際会議・国内学会・研究会・口頭発表等

*[1] Yusuke Naito, Hirochika Tanigawa, Jun Ishimoto, Masami Nakano, Takashi Noguchi, Katsuya Hirata: "Experiment and Numerical Analysis of a Rotating Hollow Cylinder in Free Flight", SimHydro 2019 [2019.6.12-14, Nice], paper 65(2019).

[2] Yusuke Naito, Hirochika Tanigawa, Jun Ishimoto, Masami Nakano, Takashi Noguchi, Katsuya Hirata: "Experiment and Simulation of a Rotating Pipe in Flight", Sixteenth International Conference on Flow Dynamics, Proceedings of the Fifteenth International Symposium on Advanced Fluid Information[2019.11.6-8, Sendai], pp.174-175.

[3] Yusuke Naito, Hirochika Tanigawa, Jun Ishimoto, Masami Nakano, Takashi Noguchi, Katsuya Hirata : "On a Rotating Hollow Cylinder in Flight", The 19th International Symposium on Advanced Fluid Information, CRF-74(2019) [2019.11.6-8, Sendai], pp.174-175.

[4] 内藤 悠介,谷川 博哉,中野 政身,平田 勝哉:"回転飛行パイプの屋外観測と数値 解析",日本機械学会 2018 年度年次大会,日本機械学会 2018 年度年次大会講演論文集 [2018.9.9-12, 吹田], S0510101, pp.1-5. 3) その他(特許,受賞,マスコミ発表等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL11APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年07月12日提出

鏃を装着したアーチェリー競技用ベアシャフトを過ぎる流れの数値解析

岩津 玲磨 東京電機大学工学研究科 教授 服部 裕司 東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

アーチェリー競技矢の飛翔に関する流体力学的研究はまださほど数が多くない.澤田らによる風洞実験,宮嵜らによる飛翔実験では,競技矢のレイノルズ数域において抵抗値の2値化が報告された.長谷川らは軸対称計算された迎角0°のシャフト表面速度分布をもとに線形安定解析を行ったが,境界層の乱流化を引き起こすほど大きい局所増幅率を得ることができなかった.伊藤らは微小な迎角をもつ場合について3次元計算された速度分布を基本流として線形安定解析を行ったが,迎角の増加とともに安定化される方向への変化がみられた.

1.2 研究期間内の最終目標

前年度実施した3次元計算において得られた定常流の速度分布をもとに線形安定解析を実施 したところ、上述のように解析結果は実験結果と矛盾する傾向を示した.このことは微小な 迎角において基本流が変化しており、平行流近似の仮定が成り立たないことを示しているも のと解釈される.そこで、今年度は微小な迎角(迎角1°までの範囲)において非定常流を 計算して、定常流が不安定化する発端となる流れの特徴を可視化によって解析する.

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
- 2.1 新しい解析手法の開発(例)新規の解析手法は特に開発していない.

2.2 新しい現象の解明(例)

矢先端に2種類の鏃、椎型鏃と流線型鏃をとりつけ、それぞれについてレイノルズ数と迎角

を変化させて計算をおこなったところ,流れが非定常化する仕方が椎型鏃と流線型鏃とで異なることが分かった.また,微小な迎角がつけられた場合に非定常流への変化の仕方に2通りのパターンがあることが分かってきた.

3. 研究目標の達成状況

矢表面境界層の不安定化の原因解明に向けて,計算結果を可視化によって調べることで,微 小な迎角の場合についての鏃の影響,迎角の影響が分かってきた.

4. まとめと今後の課題

流れの不安定化の要因としては,迎角の増加による速度分布の変化以外に,鏃付け根に発生 する剥離(椎型鏃の場合)の影響が大きいことが分かってきた.また,非定常流への変化の 仕方に2通りのパターンがあることが分かってきた.現在流れの様子を可視化に頼って調べ ているが,臨界点近くにおいて振動数,擾乱の位相速度などを定量的に解析することが今後 の課題に挙げられる.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

伊藤 一希,守 裕也,宮 嵜 武,董 紫旭,正藤 範一,岩津 玲磨,高橋 直也,迎角のつい た アーチェリー矢側面の境界層流れの安定性解析,Linear instability of the boundary layer flow along an archery arrow, ながれ, Vol.41, pp.281-290, 2022.

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

正藤 範一, 岩津 玲磨, 高橋 直也, 宮嵜 武, アーチェリー用ベアシャフト表面境界層流れに 対する迎角の影響, Numerical analysis of the effect of attack angle on the boundary layer flow along an archery bare shaft arrow, 日本機械学会 2022 年度 年次大会, J233 スポー ツ流 体 J233-02, 5pages, 9/11-14, 2022.

正藤 範一, 岩津 玲磨, 高橋 直也, 宮嵜 武, アーチェリー用ベアシャフトの空力特性, Aerodynamic characteristics an archery bare shaft arrow, [No.22-31] 日本機械学会 シン ポジウム: スポーツ工学・ヒューマンダイナミクス 2022,U00039, 6pages, 11/3, 5-6, 2022.

 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL19APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報3回数	第 1 回報告

2022年7月14日提出

固液界面における濡れ現象の分子動力学的解析と解明に関する研究

SURBLYS Donatas

東北大学流体科学研究所 助教

山口 康隆

大阪大学大学院工学研究科 准教授

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

生産や加工技術の向上に伴いナノ・マクロスケールにおける濡れ挙動は重要性を増してきた. 具体的には印刷技術の解像度がマイクロスケールまで達しており、印刷時のインクの挙動の制御 が課題となっている.また、半導体生産においては、構造がナノスケール領域までに到達してお り、リソグラフィにより基板上に加工した構造を洗浄する際に、毛細管現象による構造へのダメ ージが度々問題となっている.いずれの分野でも常に改善を試みてはいるものの、物理的な理解 に基づくものよりも、経験的な知見に頼る部分が大きい.本研究では分子メカニズムを解明する ことにより、ナノ・マイクロスケールにおける濡れ現象に多大な影響を持つ固液界面性質を明ら かにすることが目的である.濡れ挙動を分子の動きに起因する流体の運動として解釈し、分子統 計力学などによって、マイクロスケール的な分子の揺らぎとマクロスケールの濡れ現象を結び付 け、要因の解明を進めていく方法論は他ではまだほとんど確立されていない.本研究は、特に基 礎現象の理解と解明に努めているものであり、濡れ現象に関係するすべての研究の底上げを目指 している.

1.2 研究期間内の最終目標

固液界面張力,および固気界面張力について,単位長さ当たりの力という力学的意味,および, 単位面積当たりの自由エネルギーという熱力学的な意味など,物理的な解釈を踏まえて明確に表 した上で,分子動力学法による複数の算出法を確立する.特に様々な方法の特徴を整理し,酸化 膜や OH 基により表面修飾されたシリカなど,より現実的な系についての適用の可能性と意味づ けについても整理する.また,各界面の自由エネルギーを抽出し,Youngの式で表されるマクロ の濡れ理論との整合性について検証する.さらには界面エネルギーに占めるポテンシャルとエン トロピー要因の分離を試みる.

2. 研究成果の内容

2.1 共同研究の意義

分子動力学シミュレーションによってナノ・マイクロスケールにおける濡れに関する研究が多 くの観点から盛んに行われてきた. 代表的に行われてきた研究例として, 壁面上の微小な液滴の 挙動, 固体界面の幾何学的や化学的な変化による影響や動的な現象の観察などが挙げられる. 液 滴に限らず,濡れ挙動は固液界面の性質を色濃く反映しているため,工業的にも重要な知見も得 られるが,多くの場合,現象解明は界面形状の観察などの簡易な解析にとどまり,分子動力学法 によって得られる系を構成する全分子についての情報が必ずしも活かされていない. 本申請者, および共同研究者は,液相を有する界面に関して新たな解析法の開発及び世界的にみても有数の 高度な解析と解明の実績をもっており,濡れ機構を決定づける新たな要因及び制御方法のコンセ プトを確立できると考えられる. さらに本プロジェクトの根幹である申請者らの学術論文 (J. Chem. Phys. 150,044701 (2019)) が Editor's Choice に選ばれるなど高く評価されている.



2.2 固液界面張力の力学的な意味と Young の式との関係

図1 単純流体分子の液滴の接触線近傍の応力場と界面張力の関係

液滴の各界面の自由エネルギーと接触角の関係を示す Young の式は、マクロスケールの濡れ のモデルとして広く用いられている.これまでの研究から、単純な Lennard-Jones 分子で構成 される流体が平滑な固体表面上にある場合、ナノスケールでも固液、固気、気液の界面張力を 何らかの形で得て Young の式に代入して算出される接触角と、シミュレーションで測定される 見かけの接触角がよく一致することが知られているが、これらの界面張力が力学的にどのよう な意味を持つかは不明確であった.本研究では、これまでに開発した応力分布の算出法を整理 した上で、図1に示すように、静止平衡状態にある液滴の接触線を囲む矩形の検査体積を設定 し、その各面に働く応力と固体から受ける外力のつり合いが保存則を満たす形で力学的に厳密 に規定した.加えて、この各面(図中左右と上の3つの面)に働く応力分布を適切に積分する ことで、各々3 つの界面張力と接続されることを理論的に明らかにし、これにより固体から液 滴に働く壁面接線方向の力が平均的にゼロであるときに Young の式が成立することを示した. 2.3 熱力学積分法による固液界面張力の算出

クーロン相互作用のある固液界面の自由エネルギーを算出する熱力学積分手法として、これ までに固液間作用強さをパラメータとして変化させる Dry-Surface 法が確立されており、申請 者らは、先述の J. Chem. Phys. 150, 044701 (2019)で、この方法を用いて図2左に示すように Lennard-Jones 系の固液・固気界面張力を算出し、図1の応力分布の積分値とよく対応するこ とを示した. しかし、この Dry-Surface 法は OH 基が存在するシリカなど表面形状が複雑な場 合には、用いることができず、このような系においては、図2右に示すように、もう一つの熱 力学積分手法として提案されている Phantom Wall 法が有用である. いずれの方法においても、 固体面に付着した液膜を等温準静的に引き剥がす操作を行うことで、原理的には固液界面エネ ルギーを自由エネルギーの形で求めることができることが示唆されている. 本研究では、水と OH 終端されたシリカの固体表面の系において固液界面自由エネルギーを求め、理論的な接触 角を見積もり、これを実際に液滴を配置したときに現れる見かけの接触角と比較した. その結 果、広い表面 OH 密度の範囲で両者がよく一致することが示され、Youngの式がナノスケール でも成立する可能性を示した.また、これらに差異がみられるものについては、接触線がピニ ングされていることも明らかになった.このことは、先述の接触線近傍に設定した検査体積に 働く応力と固体からの外力のつり合いから導かれる結論とも矛盾しない.



図2 熱力学積分法による固液界面張力の様々な算出法

3. 研究目標の達成状況

Lennard-Jones 液膜が固体に接する系,および実現象に近い OH 基が存在するシリカ壁面上 に水液膜が接する系の双方について,最適な固液界面張力算出の方法論を提案し,分子動力学シ ミュレーションに適用した.これらの双方について,同じ壁面において液滴がなす見かけの接触 角を見積もったところ,ピニング力までを含めた力学的なバランスとして Young の式が概ね成り 立つことが分かった.これらの成果をまとめ ECS Transaction 誌に発表したことにより,本年度 の研究目的を達成することができた. 4. まとめと今後の課題

今回,固液界面張力の算出法をまとめたが,応力の算出については単純流体に限定されること,また熱力学積分法は等温準静的な引き剥がしの過程を要することや物理的な意味が不明確であるなど,各々に弱点を抱えている.今後,これらの弱点を補う新たな方法論や,狭い空間における液体について,固液界面張力を求める方法論などを確立していく.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

• Yasutaka Yamaguchi, Hiroki Kusudo, Carlos Bistafa, Donatas Surblys, Takeshi Omori, Gota Kikugawa, "(Invited) Nanoscale Wetting and Its Connection with Macroscopic Young's Equation," ECS Transactions, vol. 108 (2022), 93-102.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL20APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年07月20日提出

燃焼振動の解明に向けた直接数値計算による

火炎と非線形音響の相互作用の調査

丸田 薫, 中村 寿, 森井 雄飛,

東北大学流体科学研究所 教授,准教授,助教,

Ajit Kumar Dubey

Indian Institute of Technology Roorkee Assistant professor

研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
1.1 研究の背景と目的

研究背景

熱効率の高いガソリンエンジンを開発する上で問題となるのは、高圧縮比で発生しやすい ノッキングである.ノッキングは、流体と化学反応が複雑に絡み合った結果発生する現象 であり、エンジン内を伝播する圧力波はノック発生に強く影響を与える.また、ロケット エンジンの開発の初期段階で問題となる燃焼振動は、エンジンを破壊する可能性があり、 開発を阻害する.ノッキングや燃焼振動は圧力と燃焼の連成問題であり、実験ではその詳 細が得られず、現象の詳細な理解には至っていない.本研究では、燃焼と圧力の干渉を忠 実に再現できる直接数値計算を適用する.この直接数値計算ソフトウェアには当研究室で 開発した超高速な化学反応の時間進行法である MACKS を組み込んでおり、流体研のスパ コンを用いることで世界最大スケールの数値計算を実施可能である.

研究目的

火炎面において, 圧力が化学反応と流れ場に及ぼす影響を調べることは, 実験で困難であ るため, 実現象を忠実に再現できる直接数値計算を実施する.まず, 実験結果が公開され ているノッキングを対象に直接数値計算を実施し, 圧力変動が燃焼波に与える影響を調査 する.その後, 研究分担者が実施した管内を予混合気で満たし, 片方から着火させて自励 振動を起こす実験に対して直接数値計算を実施する. 層流燃焼は燃焼速度が音速よりもはるかに遅いため、一般に非圧縮性流体を仮定して解かれる.本研究では音響との連成を調査するため、圧縮性 CFD 解析を実施することで、現象を解明する.また、得られた結果を分析することで、燃焼振動の発生を抑制可能な理論を 構築することを最終目標としている.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

実験を再現可能なノッキングの直接数値計算は本共同研究で得られた結果を除いて存在しない.また, Dubey 先生は音響理論の構築に長けている.共同研究の成果として,ノッキング現象に関して,初期温度を変化させることにより,ノッキングの強度や発生位置が大きく異なる結果を得ることができた.

3. 研究目標の達成状況

実験結果が公開されているノッキング現象に対して,直接数値計算を実施し,初期温度を変化 させることで,ノック強度やノックの発生位置が異なることを確認できた.伝播している火炎 の振動が強くなる位置は Dubey 先生の理論式で得られた結果とよく一致していることも確認 できた.ただし,実際にこの振動がどのようにノッキングの

4. まとめと今後の課題

初期温度の影響によって,自着火発生のメカニズムの違いを明らかにすることができたが,初 期の着火エネルギーによる影響も結果に大きく影響する可能性がある.さらに,閉じた系にお ける火炎と非線形音響の相互作用を明らかにし,ノッキングの強度や発生に音波がどのよう な影響があるのかの詳細を調査する.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Numerical Study for Reproducing Knocking Experiment in a Constant Vessel with a Single Spark Igniter, ICFD 2022.

国内学会・研究会等

森井 雄飛, Ajit K. Dubey, 中村 寿, 丸田 薫:単一火花点火装置を用いた定容器内にお けるノッキング実験の数値流体解析による再現, 第33回内燃機関シンポジウム. 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL21APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年07月19日提出

アンモニア非予混合バーナー火炎における保炎消炎機構の解明

中村 寿 東北大学流体科学研究所 准教授 寺島 洋史 北海道大学工学研究院 准教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

低炭素・カーボンニュートラル社会の早期実現に向けて、二酸化炭素を排出しないクリーン な代替燃料の導入、その燃焼技術の開発は喫緊の課題となっている.アンモニア(NH₃)は、 代替燃料の有力候補として期待されている水素(H₂)の高密度輸送キャリアであるだけでな く、直接燃焼が可能な代替燃料としても考えられている.しかし、従来から広く採用されて きた炭化水素燃料に比べると、アンモニア燃焼特性の知見は少ないという課題があり、その 難燃性や燃料由来の窒素酸化物(NO_x)発生といった欠点を克服する燃焼技術の早期確立が必 要である.本研究では、アンモニア燃焼特性の理解を深めるため、基礎的なバーナー非予混 合火炎を対象に詳細反応機構を用いた燃焼流体 CFD 解析(以下,燃焼 CFD: computational fluid dynamics)を行う.特に、バーナー火炎の保炎および消炎現象の解明を目的とした.

1.2 研究期間内の最終目標

異なるアンモニア詳細反応機構を用いた解析を行い,その比較解析による保炎消炎機構の解 明を目標とした.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

アンモニアに限らず,保炎消炎境界のような限界的燃焼条件の数値予測には,流体現象だけで なく化学反応現象のモデリングが重要となる.本研究の特色は,燃焼 CFD において,化学反応 現象の高度予測を可能とする詳細反応機構を適用することにある.燃焼 CFD における詳細反応 機構の適用は,流体と化学反応現象の特性時間スケールの違いから困難とされてきたが,共同 研究者らが開発してきた解析技術によって大幅な高速化が可能となった.本研究は,この詳細 反応機構/燃焼 CFD 技術を援用したものである. 支配方程式は,各化学種質量保存式を考慮した圧縮性 Navier-Stokes 方程式で,熱的完全気体 を仮定した.方程式の解法については,文献[Terashima and Koshi, Combust. Flame, 2015]を参照い ただきたい.アンモニアの詳細反応機構には,Otomo ら[Otomo et al., Int. J. Hydrogen Energy, 2018] が提案した Otomo モデル (30 化学種, 212 反応),Nakamura ら[Nakamura et al., Combust. Flame, 2017]が提案した Nakamura モデル(28 化学種, 229 反応),また Konnov モデル[Konnov and Ruyck, Combust. Sci. Technol., 2001] (30 化学種, 240 反応)を比較解析として用いた.解析では,軸対 称条件を仮定した.軸対称バーナー中心からアンモニアが,その周りから酸化剤が噴射される. バーナー形状や流入条件の詳細は文献[武石,機論, 2017]を参照いただきたい.解析において保 炎消炎の判断は次のように行った.まず,リム壁温度を 2000 K として強制的に定常火炎を形成 させ,その後リム壁を壁温度 500 K に下げ,火炎の保炎消炎を観察した.

2.1 保炎消炎現象の予測

図1に、各反応機構モデルで得られた保炎消炎境界に関する実験と燃焼 CFD 結果の比較を示 す.バーナーリム厚さ(横軸)や酸化剤の酸素富化率(縦軸)が増加すると、保炎領域が拡大 していく傾向を確認できる. Otomo および Nakamura モデルを用いた場合には、燃焼 CFD に よって実験結果の保炎消炎境界を非常に良く予測できることが示されている.一方、Konnov モデルでは、低い酸素富化率でも保炎しており、保炎領域を過大に予測することがわかる.



Fig. 1 Comparisons of flame-holding boundary

2.2 保炎消炎機構

図2に、リム厚さ6mm,酸素富化率24.5%の場合(保炎消炎境界付近)の温度分布と流線を示す.各反応機構モデルで得られた結果を比較すると、上流のリム壁背後の再循環領域や下流の非予混合火炎形状と特徴的な燃焼流れ場構造はよく似ており、温度分布や流れ場構造では、特にKonnovモデルで見られた保炎領域の過大予測を説明することはできない.



Fig. 2 Comparisons of temperature distributions and streamlines at the rim thickness of 6 mm and O2 volume fraction of 24.5%

図3に、下流のある火炎位置(下流方向の火炎最大温度位置)における半径方向の化学種 質量分率と温度分布を示す.各分布の全体的な傾向は似ているが,燃料 NH₃の分布に着目す ると、10⁻³から10⁴と小さな分率ではあるが,酸化剤噴流側に NH₃が存在していることがわ かる.酸化剤噴流側に存在する NH₃の質量分率は,Konnov モデルが最も小さく10⁴程度で, Otomo および Nakamura モデルがほぼ同じ 10⁻³程度と一桁大きくなり,図1に示した保炎消 炎境界の比較傾向と何らかの関係があることを示唆する.仮りに、非予混合火炎を理想的な 対向流火炎と考えると、燃料 NH₃は酸化剤との間に形成される火炎で消費され,酸化剤側に 漏れ出て存在することは考えにくい.実際,Chemkin ソフトウエアを用いた対向流火炎解析 においても、酸化剤側に NH₃はほぼ存在しないことを確認している.以上の結果から、酸化 剤噴流側に存在する NH₃は上流側から移流してきたと予想でき、上流側、特に再循環領域を 分析する必要性が示唆される.また、ここでの議論は酸化剤噴流側に存在する NH₃としてい るが、燃料噴流側に存在する酸素 O₂も同じメカニズムで説明可能といえる.



Fig. 3 Profiles of mass fraction of species and temperature at a flame position

上流側において NH₃を消費する火炎が形成されない領域はリム壁背後の再循環領域である. よって、再循環領域を通して酸化剤側に NH₃ (燃料側に O₂) が移流されていくと考えるのが 自然である.そこで、図4に再循環領域内 (h=0.2 cm) における半径方向の化学種質量分率 と温度分布を示す.図2に示した火炎位置の傾向と同様に、再循環領域内の NH₃の質量分率 は、Konnov モデルが最も小さく 10⁻³ 程度で、Otomo および Nakamura モデルが 10⁻² 程度と大 きくなる.また、再循環領域内の最高温度も Konnov モデルが最も高く、Nakamura モデル、 Otomo モデルと続くことがわかる.この結果から、Konnov モデルでは、再循環領域内におい て反応が最も速く進行し、NH₃の消費、またその結果として熱発生を促進していると考えら れる.最高温度が高いことは、火炎基部への熱供給が大きいことを示唆し、その結果、保炎 の可能性を高めると考えられ、図1 で示された Konnov モデルの保炎領域拡大の傾向を説明 できる.さらに、再循環領域内の NH₃の消費は、下流に移流される NH₃ が減少することを意 味し、Konnov モデルで見られた下流火炎位置において NH₃ の質量分率が小さいことも説明 できる.よって、以上の結果は、再循環領域における反応進行の重要性を具体的に示すもの であり、再循環領域内の反応進行の予測精度がバーナー保炎消炎境界の予測精度を決定する 重要な要素と結論できる.以上の議論を図示したものを図5に示す.



Fig. 4 Profiles of mass fraction of species and temperature in the recirculation region (h = 0.2 cm)



Fig. 5 Schematic for the importance of reaction progress in the recirculation region: advection of NH_3 and O_2 in the downstream flame region

再循環領域内の反応進行を測る指標として,予混合ガスの自着火時間に着目した.再循環 領域内では燃料と酸化剤が滞留し混合するため,理想的な予混合ガスが形成されるわけでは ないが,予混合ガスの状態になり得ると仮定した.図6に各反応機構で得られた自着火時間 の比較を示す.結果から、今回対象とした温度範囲では、Otomo モデルが最も自着火時間が 長く、反応進行が遅いことがわかる.高温条件では、Nakamura モデルと Konnov モデルの差 が表れ、Nakamura モデルで自着火時間が長くなる傾向を確認できる.ここから、少なくとも Otomo モデルでは再循環領域内の反応進行が他のモデルよりも遅く、多くの NH₃が下流に移 流、また火炎基部へ十分な熱供給ができずに保炎性能は低くなることが予想される.また、 高温条件の傾向から、Nakamura モデルも Konnov モデルに対しては、反応進行が遅く、保炎 性能は低くなることが示唆される.これまでの保炎消炎機構の議論において、Otomo および Nakamura モデルでは明確な差は見られていないが、条件によっては違いが表れ、その場合に は Nakamura モデルの方が保炎性能が高くなることが予想される.また、Chemkin ソフトウェ アを用いた対向流消炎解析を実施したが、最大火炎伸張率は、Konnov モデルが最も高く、 Otomo モデル、Nakamura モデルと続く傾向が得られている.そのため、火炎伸張の観点から も、Konnov モデルが最も保炎しやすいと考えられる.



Fig. 6 Comparison of ignition delay time (hp constant condition)

3. 研究目標の達成状況

バーナー火炎における再循環領域の重要性はよく知られているが、滞留や混合促進の議論に留 まることがほとんどである.今回の解析では再循環領域内の反応進行が重要であることを具体 的に示した.特に、下流火炎位置における NH₃や O₂の存在を明らかにし、それらが上流の再循 環領域から移流してくること、その移流量が再循環領域の反応進行に依存することから、再循 環領域内の反応進行が保炎消炎現象の支配的要因であることを提示した.

4. まとめと今後の課題

アンモニアバーナー非予混合火炎の保炎消炎現象を明らかにするため,詳細反応機構を用いた 燃焼 CFD 解析を実施した.本燃焼 CFD によって得られた温度や化学種分布から,リム壁背後 に形成される再循環領域内の反応進行がバーナー保炎消炎現象の支配要因となることを示した. これは,下流の火炎位置における NH₃や O₂の存在から見出したもので,再循環領域の重要性を これまでの研究とは異なる角度から示した新たな研究成果といえる.今後の解析では,再循環 領域内における化学反応素過程の解析等を通して,保炎消炎現象を支配する燃焼特性パラメー タの探求を行う. 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

C.E. Samuel, C. Tongtong, H. Terashima, H. Nakamura, J. Hayashi: Numerical investigation of flame holding and extinction characteristics of ammonia burner, Proceedings of the 33rd International Symposium on Transport Phenomena, (2023).

国内学会・研究会等

寺島洋史,中村寿,林潤:アンモニア非予混合バーナー保炎消炎機構における再循環領域の 重要性について,日本機械学会熱工学コンファレンス (2023).

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL22APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

熱的に誘起されたクヌッセン力による物体の非接触制御に関する研究

小原 拓,オティック・クリントジョン 東北大学流体科学研究所 教授,D3 米村 茂 中部大学工学部機械工学科 教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

物体の配置や温度設定,表面構造など,なんらかの方法により,気体分子の平均自由行程 程度の微小な空間スケールで物体周りの気体に温度変化を作り出したとしよう.そして,は じめ気体が静止していると仮定すると,このことは空間のいたるところで分子の正味の数流 束(流速)が 0 であることを意味するため,物体のある表面部分を考えたとき,その表面部分 に高温気体側から入射する分子の数と低温気体側から入射する分子の数は等しい.しかし, 高温気体側から入射する分子の方が低温気体側から入射する分子より平均的に高エネルギー であるため,高温気体側から入射する分子によって物体表面にもたらされる運動量は,低温 気体側から入射する分子によって物体表面にもたらされる運動量は,低温 気体側から入射する分子によって物体表面にもたらされる運動量は,低温

この現象は平均自由行程程度の空間スケールで気体に温度変化がある場合,つまりクヌッ セン数が1程度まで大きい場合にのみ生じる.温度変化の空間スケールが平均自由行程より ずっと大きい場合,つまりクヌッセン数が小さい場合には,物体表面に入射する気体分子の 出発領域の気体温度はいずれの方向からでも等しくなるため,このような力も流れも生じな い.上述の例はもっとも分かりやすい力の例であるが,このほかにも温度の2階微分に依存 する力も報告されているし,流れが生じることにより,気体の密度や圧力の空間分布が変化 して,2次的な現象として大きな力が加わることも考えられる.これらの力はすべて,クヌ ッセン数が1程度まで大きい場合にのみ現れるため,このような力を総称してクヌッセン力 と呼ぶことにする.

研究代表者と共同研究者の米村はこれまでに、ノコギリ歯状の表面構造をもつ加熱基板周 辺に置かれた低温物体に働く剪断的なクヌッセン力などを調査してきた.これらの経験から、 物体をある基準に対してセンタリングする力や,さらにそれを吸着する力を生じさせて,非 接触状態のままピンセットのように摑むのに有望な方法に思い至った.その考えが正しいこ と,また,改善するにはどのようにすればよいかをスーパーコンピュータを用いた数値シミ ュレーションにより調査する.

1.2 研究期間内の最終目標

着想した方法で、予想の通り、非接触状態でピンセットのように物体をつかむことができ るのか確かめ、そのメカニズムを調べる.

2. 研究成果の内容

2.1 分子シミュレーションによる検証

本研究では、図1のように、高温環境下で、低温の直方体形状の物体に薄い高温の板を近づけることによって、高温の板で低温物体を非接触状態で担持できるのではないかと考えた. 領域の上部と下部には無限に広い高温の平板を配置し、上部の平板には高温の薄い板が垂直 に取り付けられ、その近傍に直方体形状の物体が配置されている.両平板間は空気で満たさ れている.平板間の空気の気体分子の平均自由行程の予測値を λ_{ref} とすると、平板間距離は 27 λ_{ref} とし、上部の高温平板から直方体物体までの距離を $5\lambda_{ref}$ とする.上側平板に取り付け られた薄い板の長さはパラメーターとして変化させたが、ここでは代表的なケースとして、 板の長さを $4\lambda_{ref}$ とした場合の結果を示す.この場合には、板の尖端と直方体物体の間の距離 は平均自由行程 λ_{ref} の距離となり、クヌッセン数は1となる.



図 1

このように、クヌッセン数が1程度の流れの場合には、高温の気体中に低温の物体が浸さ れれば、物体の角のような尖端部に向かって、物体の表面に沿って気体の流れが誘起される. この流れを熱尖端流という.熱尖端流は尖端付近の物体表面に沿って、低温側から高温側に 向かって誘起される流れであり、高温の薄い板は周囲の空気より高温となるため、板の尖端 から板の付け根に向かって流れが生じる.これらの流れにより、直方体形状の物体を薄い板 に吸い付けるように働く圧力分布が直方体物体の表面に形成されるのでは無いかと考え,こ の状況をDSMC法に基づいた分子シミュレーションにより調べた.シミュレーションによっ て得られた温度分布と圧力分布を図2および図3に示す.両図には流れ場も合わせて示す. 物体の各コーナーで面中央部から尖端に向かって形成される熱尖端流により,流れ場が誘起 される.例えば,物体の下表面では,下表面の中央部から左右の角に向かって熱尖端流が生 じる.この熱尖端流はポンプの役割をするため,表面中央部の気体分子を外側に運び去り, 表面中央部の圧力が低下する.物体の下表面の中央部で圧力が低下すれば,物体の下側には 比較的大きな空気の領域があるため,そこから空気を吸い上げ,下から上に向かう大きな流 れが生じる.この熱尖端流は直方体物体の全ての面で面中央部から角に向かって生じ,気体 分子を外に取り出すポンプの役割をするため,図3に示すように物体表面近傍の圧力が低下 する.





図3



図4

物体近傍の圧力分布を図4に拡大して示す.上述したように、熱尖端流は直方体物体の全 ての面で面中央部から角に向かって生じるはずであるが、左右の側面では、面中央から下側 の角に向かう流れが発生せず、反対向きに流れている.これは、熱尖端流とは流れを駆動す る作用を意味しており、この流れとは別に強い流れが外部から加えられれば、流れ場はその 合算として現れるため、熱尖端流が見えなくなるためである.外からの流れが圧力を低下さ せることは無いが、物体の左右の側面近傍で圧力が低下しているのは、熱尖端流による作用 がポンプの役割をして、その領域の気体分子を外に掃き出しているためである.図4から熱 尖端流の効果により、物体の各表面の圧力が低下していることがわかる.しかし、最も強い 流れが生じている物体の下側表面付近では、面中央部の圧力低下が他の面ほど顕著ではない. これは、物体の下側表面付近で低圧が生じても、下側の広い領域から気体分子を吸い込んで 圧力低下が緩和されるためである.

上側の基板に取り付けられた高温の薄い板の尖端付近でも流れが生じている.この場合, 薄い板は周囲の気体の温度より高温であるため,板の尖端から板の根元に向かう流れが生じ る.つまり,尖端付近の気体を吸い込んでいる.このため,板の尖端近くの物体表面の圧力 は低圧になる.図4の状況では,板は物体の中央より右側にあるため,物体上面付近の右側 領域の圧力が顕著に低下しており,物体右側面付近の圧力も低下する.この低圧の生成によ り,物体を上に押し上げる力と右に寄せる力が生成される.

図5に物体表面に働く応力の分布を示す.流体中の物体に働く応力は,垂直応力が圧倒的 に大きく,接線応力は小さい.物体表面に働く絶対的な力をそのまま表示すると,接線応力 は見えなくなってしまう.一方で,物体表面の圧力pを物体表面での平均値pと平均値からの ズレp'に分割すると,表面平均圧力pは物体を等方的に圧縮しようとするだけで,物体を移動 させる力としては作用しない.以上のことから,図5では物体表面の平均圧力pを各表面要素 に働く応力の垂直成分から差し引いて表示している.これにより応力の垂直成分と接線成分 は同程度の大きさとなるため,両方の力を同時に観察できるようになる.ただし,圧力が平 均値より小さい箇所では,負圧が生じているように表示され,表面を外側に引っ張る力が働 いているように示されることになる.実際には引張力は働かないが,物体表面で応力を積分 すると,その部分では引張力の向きの正味の力を物体に加える効果をもたらしているという ことである.

図5(a)から、板が物体中央にある場合には、左右対称な力が働き、物体を上に押し上げる 力が働くことがわかる.図5の(a)から(b)、(c)にいくにしたがって、板の位置は物体中央から 物体の右端まで移動している.図5(b),(c)から,板が物体中央より右側に移動するにしたがって,右向きに働く力が大きくなっていることがわかる.そして,その場合にも上下方向では上向きの力が働いている.以上のことから,板が物体中央からズレている場合には,物体が板に引き寄せられ,板が物体中央にある場合には左右方向の力が働かないので安定することがわかる.図で応力は周囲の平均圧力で除して正規化されている.正規化応力の大きさは0.005~0.01程度であるが,周囲圧力が1atmの場合には,正規化応力が0.005とは,5cmの高さの水柱を持ち上げることができる力であり,小さな物体を動かすには十分な力である.このことから,板は非接触状態でピンセットのように物体を担持できると言える.



(b)



(c) 図 5

- 125 -

3. 研究目標の達成状況

着想した方法で,非接触状態でピンセットのように物体をつかむことができることを示し, その動作機構も説明した.研究目標は達成されたと言える.

4. まとめと今後の課題

本研究により,提案した方法でピンセットのように物体を担持できることを示したが,高 クヌッセン数の流れ場は複雑で,通常の流れの考え方からは予測できないような現象が起こ り,クヌッセン力は予想したようにはなかなか働かない.今後もクヌッセン力を研究して行 く必要がある.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文·学会発表

学術雑誌

1. C.J.C. Otic and S. Yonemura, "Thermally Induced Knudsen Forces for Contactless Manipulation of a Micro-Object," Micromachines, Vol.13, 1092 (2022).

国内学会・研究会等

- 1. オティック・クリントジョン,小原 拓,米村 茂: 熱的に誘起されるクヌッセン力を用い たピンセット様装置に関する研究,日本機械学会 2022 年度年次大会, J052-08 (2022).
- 5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等)

該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL23APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月19日提出

熱遷移流に対する大規模分子動力学解析

菊川 豪太 東北大学流体科学研究所 准教授

山口 浩樹

名古屋大学大学院工学研究科 准教授

- 1. 研究の目的と目標
- 1.1 研究の背景と目的

マイクロ・ナノテクノロジーの発展とともに熱流動場の微小化が進んでいる.それに伴 い,流れの希薄度を表す無次元数であるクヌッセン数が重要なパラメータとなってきてい る.クヌッセン数は,流体を構成する分子が他の分子と衝突するまでに移動する平均的な 距離である平均自由行程と系の代表長さの比で定義される.熱流動場の微小化は,系の代 表長さが小さくなるためにクヌッセン数の大きい「高クヌッセン数流れ」をもたらす.そ の結果,希薄気体流れと同様の効果が生じることが知られている.このような流れに特異 な現象の一つとして,流路壁面の温度勾配によって低温側から高温側へと誘起される熱遷 移流がある.熱のみで流れが生み出されるため,マイクロデバイスでの流れへの影響が危 惧される一方で,ポンプなどへの応用が期待されている.この熱遷移流に関しては,様々 な解析や実験が行われてきているが,熱遷移流場そのものの内部における詳細な流動構造 については十分に明らかになっているとは言い難い.特に数値解析で広く用いられている 直接シミュレーションモンテカルロ(DSMC)法などでは分子の衝突過程がモデル化され ており,平均自由行程以下の解像度でもって流動構造の解析を行うことはできないため, 結果として分子動力学(MD)解析が要求される.

そこで本研究では,MD 解析を用いて大規模数値シミュレーションを行うことにより直接的に熱遷移流の流動構造を解析し,その特性を明らかにすることを試みる.具体的には,微細流路を構成する壁面分子に温度勾配を課し,流路内部での流動を,特に壁面近傍に着目しながら解析する.

1.2 研究期間内の最終目標

本計算においては、流路壁面を構成する固体分子の熱運動の影響を明らかにするために、

流路壁面の固体分子を全て陽に扱う. そのため,非常に大規模な数値解析が必要となる. さらに,熱流動場の流速や温度などの物理量は気体分子の熱運動に対する平均量から導出しなければならない. 計算条件としては高クヌッセン数流れとなる希薄な条件であるため,流速ベクトルを十分な空間分解能で取得して精度良く流動構造を明らかにするには十分な統計量を確保することが求められる. Dense gas の条件から dilute gas の条件へと数密度を段階的に変化させた数値解析結果から,数密度条件が流動構造へ与える影響の詳細を解析する.

2. 研究成果の内容

本研究では熱遷移流の流動構造について dense gas の条件を基に,分子数を変えることな く流路の代表長さである流路壁面間距離を段階的に変更して dilute gas の条件まで解析を実 施した.さらに空間解像度を確保するために,計算時間を変化させることで同一の空間セル に対して同等のサンプリング数を確保した.その結果,dense gas から dilute gas の条件に 至るまで熱遷移流の構造は大きく変化しないことが明らかとなった.また,流路壁面からの 距離に応じた分子の層構造において内部の残存確率を求めることで,壁面近傍の吸着層の存 在を明らかにした.そして,一般的な希薄流で見られている熱遷移流は dilute gas の条件で あるが,dense gas の条件と同様,吸着層が重要な役割を果たしていることを明らかにした. さらに,その吸着層内部での分子の運動を詳細に解析し,分子の挙動と熱遷移流の関係を解 析することに成功した.

3. 研究目標の達成状況

目標通り,計算時間を変化させることにより,同一の空間セルに対して同等のサンプリン グ数を確保し,dense gasから dilute gasの条件までにわたる数密度の影響を直接的に比較検 証することに成功した.そして,分子の残存確率の解析より数密度条件に関わらず吸着層が 形成されることを明らかにし,吸着層内の分子の詳細な解析から熱遷移流の誘起には吸着層 が重要な役割を果たしていることを明らかにすることができた.

4. まとめと今後の課題

微細流路の壁面において流れ方向に対して温度勾配を課した系を構築し, MD 法による大規 模数値解析を行うことによって, dilute gas の条件下で直接的に熱遷移流を再現することを目 指した.壁面近傍における熱遷移流を捉え,吸着層の存在とその内部における分子運動の解 析から熱遷移流における吸着層の役割を解析した.今後,投稿論文へと成果をまとめる.

5. 研究成果リスト

なし
プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL24APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月19日提出

分子動力学シミュレーションによる

界面ナノバブルの応力と安定性の解明

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

堀 琢磨

東京農工大学大学院工学研究院先端機械システム部門 准教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

固液界面上の界面ナノバブルは窒素からなり、工学的に様々な面で重要であるため、これ まで数多くの研究が報告されている.具体的には、その生成および安定性に焦点を当てた理論 的・数値的・実験的な研究がおこなわれている.特に数値的な手法として、分子動力学 (Molecular Dynamics, MD)法を用いて、微細な機序の解明が試みられてきた.一方で、こう した分子シミュレーションを用いることで、実際に混入するコンタミネーションの影響を明ら かにする研究は、十分におこなわれていない.例えば二次元系のシミュレーションや、実際の 水のふるまいを再現しない簡略的なポテンシャルを用いた研究が行われているが、より現実に 近い研究により現象を明らかにする必要がある.また、分子シミュレーションにおいてアプロ ーチしやすい応力のバランスなどの研究を行うことで、より詳細な現象の解明を試みる必要で ある.

そこで本研究では、分子動力学シミュレーションを行うことで、窒素気体からなる界面ナ ノバブルの形状とその内部の応力の評価を行い、基板表面におけるナノバブルの安定性のメカ ニズムを明らかにする.

1.2 研究期間内の最終目標

窒素気体からなる界面ナノバブルの生成シミュレーションを行い,特にコンタミネーションを模擬した界面活性剤が果たす役割に着目し,その空間分布を明らかにする.

 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください) 共同研究により、分子動力学シミュレーションを用いた研究を速やかに行う.またシミュ レーション負荷の都合上、大規模な処理が可能な計算機を使用する必要がある. まず,グラファイト基板・水・窒素気体からなる系において,界面ナノバブルの生成シミュレ ーションを行った.図(a)に示す系の断面図のように,底面のグラファイト基板の中央部分を界 面ナノバブルの形成のため疎水性にした.天面のグラフェンは,圧力制御のために設けた.分 子動力学シミュレーションではまず,系の緩和のため天面のグラフェンに圧縮方向に力を加え た,その後に界面ナノバブル生成のために圧力を解放した.

上述のような操作により、グラフェン基板上に形成した窒素ガスからなる界面ナノバブル が生成可能であるが、コンタミネーションの影響を明らかにするため、界面活性剤の分子を刑 の構成の際に導入した.界面活性剤として、ペンタノール分子を用いた.これまでの研究によ り、界面活性剤の導入により、界面ナノバブルは平坦な形状となることがわかった.この際、 図(b)に示す数密度分布から、界面活性剤分子は三相界面付近に集中的に分布することが分かっ た.また、基板直上のペンタノール分子の空間分布を評価した結果、その数を増加させること で空間的な局所的な分布が飽和することが明らかとなった.さらに界面活性剤分子の OH 基と 気液界面の法線とがなす角を求めた結果、図(c)に示すように、界面付近の界面活性剤分子は水 分子の方向へ方位し、界面から離れるにつれてランダムな方向に方位することがわかった.し たがって、界面活性剤は気液界面において、その表面張力を減少させるように働くことが明ら かとなった.

3. 研究目標の達成状況

界面活性剤の界面ナノバブルの形状への影響やその空間分布を明らかにした.また,界面ナ ノバブルを構成する窒素分子の応力分布を評価した.一方で,これらの定量的な関係に関して は未だ明らかとなっていない.

4. まとめと今後の課題

これまでの分子動力学シミュレーションを用いた研究によって,界面活性剤を導入した際の 界面ナノバブルの形状へ及ぼす影響を明らかにした.この結果は,界面活性剤は気液界面の表 面張力を減少させる役割を持つことが示唆された.また,ナノバブル中の窒素気体分子の応力 分布解析を行った.応力分布が気泡形状へ及ぼす影響に関しては,定量的な評価が今後必要で ある.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

国際学会

[1] Takuma Hori, Gota Kikugawa, Ichiro Ueno, and Yoichiro Matsumoto, "Role of Pentanol Molecules in Surface Nanobubble Composed of Nitrogen Gas", 19th International Conference on Flow Dynamics, online, (2022).

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL26APR22
研究種別	共同研究
利用期間	2022.04~2023.03
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

パッシブな外部駆動力因子を有した自然対流境界層中の

不安定成長の解明

小宮 敦樹, 小泉 匠摩

東北大学流体科学研究所 教授,博士1年

古川 琢磨

八戸工業高等専門学校 准教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

これまでの研究で、ある一定度のレイノルズ数で衝突噴流を自然対流境界層に付加する時、 特定周波数で自然対流境界層の遷移が促進することが明らかとなっている.また境界層の熱 伝達率も向上することが明らかとなっている.さらに、ふく射伝熱による作動流体の発熱効 果によって境界層の遷移が抑制されることが明らかとなっている.以上のように、自然対流 境界層は非常に弱い外力因子によって乱流成長が劇的に変化することが示唆されている.し かしながら、これらメカニズムについては定量的には明らかとなっておらず、大規模な流体 解析の実施による乱流成長メカニズムを把握することが必須である.そこで本研究では、 OpenFOAM と独自のライブラリを用いた大規模数値解析の実施を行い、低駆動の衝突噴流、 ふく射効果による発熱効果等の外的因子が付与された系での自然対流境界層の不安定成長メ カニズムの解明を目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間中は微弱噴流による共鳴効果のメカニズムを解明するために、微弱噴流の温度 および、噴流速度を制御し自然対流境界層の不安定成長がどのように変化するかを把握する ことを目標とした.また光干渉計を用いた境界層可視化実験およびふく射・対流の連成伝熱 解析を行い、常温環境での表面ふく射効果による自然対流境界層の制御可能性について論ず ることを目標とする.

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - 2.1 微弱な浮力衝突噴流における自然対流境界層の共鳴現象と伝熱促進

本研究では、浮力を有する微弱な衝突噴流を自然対流の上流に付与することにより、自 然対流境界層の不安定性がどのように成長するかを、数値解析を用いて議論した.解析の 結果、特定の衝突噴流の温度範囲では不安定成長が促進され、それに伴い伝熱量も増大す ることが明らかとなった.不安定成長が促進する噴流温度は局所的に存在しているが、一 昨年までで評価された、噴流の運動量を示す Re と組み合わせることにより、低エネルギー 消費な自然対流伝熱促進が可能であることを示唆している.これまでは不安定性を用いた 伝熱促進は、低 Re 範囲で限られていた.本研究では Re に加え、噴流温度が低エネルギー 伝熱促進に向けて利用可能なパラメータであることを示した結果となり、本研究の意義は 大きいと考える.

2.2 表面ふく射効果による自然対流境界層の空間発展の制御

本研究では、非対称加熱・冷却壁面を有した矩形キャビティの自然対流境界層の可視化 実験を行い、表面ふく射の境界層空間発展への影響を議論した.具体的にはキャビティ内 部の周囲断熱壁の放射率を制御し、等温壁面および断熱壁周囲の温度境界層の空間構造を 評価した.実験の結果放射率の制御により温度境界層が制御可能であることが実験的に示 された.さらにふく射・対流伝熱の連成解析との比較により、確証性の高い議論にも昇華 することができた.これまで、表面ふく射効果による境界層の発展構造の変化は数値解析 による理論のみの議論であったため、実験的な同時検証も行った本研究の意義は極めて大 きいと考える.

3 研究目標の達成状況

本研究期間中では主に微小な浮力衝突噴流付与時の自然対流境界層の不安定成長について, 周波数特性の観点から議論を行った.衝突噴流の温度が高くなるにつれ,噴流が自然対流境 界層に衝突する高さや方向が変化し,境界層の挙動が共鳴,対流不安定,乱流と変化するこ とが明らかとなった.本研究では境界層の不安定成長の因子解明を目的としており,噴流温 度によって不安定成長方法が変化することを示唆した点においては本研究の主目的はおおむ ね達成できたと考える.

また光干渉計による可視化実験および、ふく射・対流連成解析による議論から表面ふく射 効果による境界層制御の可能性を高い確度を示せたことに関しても本研究の目的はおおむね 達成できたと考える.

4 まとめと今後の課題

本研究期間によって,微小噴流の温度変化による自然対流境界層の不安定成長性について 論じた.計算結果では,振動周波数の観点から境界層成長の変化について議論した.今後は 自然対流境界層での運動量保存,エネルギー保存の観点から不安定成長が浮力もしくは慣性 力起因どちらに支配されているかの区別を行う予定である.また,共鳴現象のロバスト性に ついても評価を行う予定である.

さらに、ふく射性媒体を含有した自然対流境界層可視化実験を行いガスふく射効果による 境界層の発展構造について論ずる予定である.

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- J. F. Torres, N. Ogasawara, T. Koizumi, Y. Kanda, A. Komiya, "Low-energy activation of large convective heat transfer via flow resonance triggered by impinging jet", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 195, 2022.
- T. Koizumi, T. Kogawa, J. F. Torres, Y. Kanda, A. Komiya, "Controlling instability waves on vertical natural convection using a buoyant impinging jet", *International Communications in Heat and Mass Transfer* (under review).
- T. Takagi, T. Koizumi, A. Komiya, J. OKajima, H. Gonome, T. Kogawa, "Investigating the Impact of Wall Emissivity on Natural Convective Heat Transfer: An Experimental and Numerical Study in a Rectangular Cavity", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, (under review).

国際学会

 Takuma Koizumi, Juan F. Torres, Yuki Kanda, and Atsuki Komiya: Evaluation of the heat transfer mechanism in a natural convection boundary layer perturbed by a local mixed convection regime, 12th Australasian Heat and Mass Transfer Conference, (2022), 63.

国内学会・研究会等

- 高木松誠,小泉匠摩,古川琢磨,小宮敦樹木:固体熱伝導を加味した三次元モデル内でのふく射・対流連成解析と光干渉計による自然対流境界層の妥当性評価,第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,F221.
- 小泉匠摩, Juan F. Torres, 神田雄貴, 小宮敦樹: 衝突噴流を用いた自然対流伝熱促進 に向けた局所混合流体現象評価, 第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, BPA1431.
- 小泉匠摩,小宮敦樹:低レイノルズ数浮力衝突噴流による共鳴現象を用いた伝熱促進, 第10回東北大学若手研究者アンサンブルワークショップ,P-11.
- 小泉匠摩,古川琢磨, Juan F. Torres,神田雄貴,小宮敦樹:低レイノルズ数浮力衝突 噴流が自然対流温度境界層に与える影響評価,第 60 回日本伝熱シンポジウム講演論文 集,H1444.
- 高木松誠,小泉匠摩,古川琢磨,小宮敦樹:矩形キャビティ内部の壁面放射率特性が自然対流温度境界層,第60回日本伝熱シンポジウム講演論文集,J224.
- 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL27APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月19日提出

相分離構造を有する高分子材料のマルチスケール数値解析

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

岡部 朋永

東北大学工学研究科 教授

Zhao Yinbo

東北大学工学研究科 特任助教

李 楷文

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 博士前期課程

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

高機能・高生産性を有する高分子材料を選別するためには、大きく2つの困難が伴う。第一 に、高分子材料の多種多様性から最適材料の候補が無数に存在することである。航空機用複合 材料のマトリクス樹脂の代表であるエポキシ樹脂は主剤と硬化剤との架橋反応により、高い 熱・機械物性を発現するがこれらの組み合わせに限ってみても 1000 種類以上の材料が販売さ れている。したがって、実験を代替する数値計算ベースの材料選択技術が急務である。第二に、 分子量の大きく異なる高分子材料では現象の空間的・時間的スケールが大きく異なり、複合し た際の現象理解が非常に困難であることである。例えば、上記のエポキシ樹脂はその比強度・ 比剛性の高さに対して、靭性が低いという欠点がある。この欠点を克服するために、少量の熱 可塑性樹脂を添加し破壊の進展を分散させるという方法がとられているが、その構造形成と 破壊進展のメカニズムはいまだ推測の域を出ていない。今後の実験の指針となる数値計算技 術の開発が必要不可欠であるが、熱硬化性樹脂の架橋反応と熱硬化性樹脂の相分離挙動とで は空間的・時間的スケールが大きく隔たっており、これまで単一の数値計算手法による再現は 困難であった。本研究では、分子動力学計算や自己無撞着場理論といったスケールの異なる数 値計算手法を有機的に接続し、熱硬化性樹脂/熱可塑性樹脂複合系の物性を分子レベルからメ ソスケールに渡って再現できる「マルチスケールシミュレーター」を開発するとともに、機械 学習等の情報科学技術と組み合わせた高分子材料の多目的材料探索を行うことを目的として いる。

1.2 研究期間内の最終目標

原子スケール・粒子ベースの数値計算として、正確な第一原理計算と GRRM (Global Reaction Route Mapping method) アルゴリズムを組み合わせることにより、熱硬化性樹脂 の正確な反応エネルギーを取得する手続きを確立する。反応エネルギーは MD 計算における 反応判定で用いられ、精緻な化学反応を架橋高分子材料において再現することが可能となる。本手法を分子量の比較的大きなエポキシ系に適用する。エポキシ樹脂の主剤として TGDDM と DGEBA を、硬化剤として 4,4'-DDS や DETA を考慮し、これらの分量や組成比(多成分 系の場合)を変化させ、熱伝導率やヤング率、密度、ガラス転移温度の変化と、これらの変 化に影響を及ぼす架橋構造の分子論的なメカニズムを考察する。

メゾスケールの数値計算として、MD 法および散逸粒子動力学(DPD)法を連携したシ ミュレーション手法の高精度化および高速化を実施する。ここでは、DPD における粗視化ス ケールの影響を評価した。

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

MD シミュレーションにおける全原子モデルをグループに分割し、DPD 粒子として粗視 化を行った。各 DPD 粒子に対応する全原子モデルを用いて MD シミュレーションを実施し、 DPD 粒子間の相互作用を Flory-Huggins 理論に基づいて決定した。さらに、高分子鎖を構成 する DPD 粒子間の共有結合相互作用についても MD シミュレーションから決定した。さら に DPD 粒子の粗視化レベルを変化させることで、硬化反応にどのような影響があるか明確 にした。

- 研究目標の達成状況
 当初の計画通りに進行している。
- 4. まとめと今後の課題

反応モデルを組み込んだ MD 法と DPD 法を連携し、原子スケールからメゾスケールに渡る 複合材料用高分子の特性を計算する手法を高速化・高精度化した。分子動力学法においては、 多種・多成分系を含むエポキシ樹脂にてその正確性を確認した。DPD 法における粗視化レベル を解析し、架橋反応過程への影響を評価した。今後、原子からメソスケールまでをブリッジす る数値計算手法を用いて、メゾスケールの相分離を伴う高分子材料の構造・物性計算を実現し たい。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

1. Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, and Tomonaga Okabe, Molecular-scale investigation on relationship between thermal conductivity and the structure of crosslinked epoxy resin, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 198 (2022), 123429.

国際学会

1. Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, and Tomonaga Okabe, Unveiling the relationship between thermal conductivity and the structure of crosslinked epoxy resin, The 13th Asian Thermophysical Properties Conference, Sendai (online), Japan, (2022), OS2-3-03.

2. Kaiwen Li, Gota Kikugawa, Yoshiaki Kawagoe, Yinbo Zhao, Tomonaga Okabe, Bottom-up exploration of interaction parameters in reactive DPD simulation for epoxy polymers, The 13th Asian Thermophysical Properties Conference, Sendai (online), Japan, (2022), OS2-2-03.

国内学会

1. Li Kaiwen, 菊川 豪太, 川越 吉晃, Zhao Yinbo, 岡部 朋永, 架橋高分子材料の反応 DPD シミュレーションにおける相互作用パラメータのボトムアップ探索, 第59回日本伝熱シンポ ジウム, (2022), BPA1422.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL28APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月27日提出

液体ロケットインデューサで生じるキャビテーション不安定現象の 抑制に関する三次元数値解析

伊賀由佳,岡島淳之介 東北大学流体科学研究所 教授,准教授 佐々木 裕章 日本原子力発電株式会社

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

液体ロケットエンジンターボポンプの開発において、インデューサに発生するキャビテー ション不安定現象はフライト前に必ず抑制しなければいけない現象である.これまで世界中 の液体ロケットでは、ケーシングを加工することで不安定現象を抑制してきたが、本研究グ ループではそれと組み合わせてより広範囲な運転条件に対して抑制効果を発揮することが期 待できるスリットブレードの開発を数値解析と実験を通じて行ってきた.本抑制手法は、将 来の液体ロケットエンジンシステムとして現在 JAXA で検討が始まったばかりの、エンジン のモジュール化における、これまでにない広範囲な作動条件を要求されるターボポンプにお いて、将来的に有効な技術となると期待されている.また、本研究グループは、液体ロケッ トの推進剤に用いられる極低温流体特有のキャビテーションの熱力学的的自己抑制効果を表 現可能、かつ、現状の汎用数値流体解析ソフトウェアの全てが搭載している均質モデルに適 用可能な形の独自の簡略化熱モデルを提案している.本プロジェクトではそのモデルを汎用 数値流体解析ソフトウェアに UDF として搭載することを試みる.これにより、液体ロケット の実液推進剤におけるキャビテーションの熱力学的自己抑制量を考慮しながら、ターボポン プに発生するキャビテーション不安定現象の抑制手法を検討する世界初の数値解析が実施で きる.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究プロジェクトでは、特に液体ロケットインデューサでのキャビテーション不安定現 象の抑制に着目し、伊賀研究室で開発したスリットブレードと実機インデューサ開発メーカ である IHI が提案する逆流返しライナを適用したインデューサについて、それぞれ抑制効果 を確認する数値解析を実施する.さらに、それらを組み合わせた際の相互効果についても数 値解析で確認する.また、これまで理論解析で用いられ、最近では実験で取得することが試 みられている,ポンプシステムの動的パラメータ(マスフローゲインファクタとキャビテー ションコンプライアンス,またそれらの位相差)を数値解析結果を用いて評価する方法を検 討し,実際の抑制の程度とそれらの値の関係を明らかにすることによって,パラメータが抑 制の程度を表す指標となり得るかどうか検討する.さらに,熱力学的抑制効果を再現できる 簡略化熱モデルを UDF として追加することにより,液体ロケットの実液推進剤におけるキャ ビテーションの熱力学的自己抑制量を考慮しながら,ターボポンプに発生するキャビテーシ ョン不安定現象の抑制手法を検討する

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 スリットインデューサの不安定抑制効果の検討

キャビテーション不安定現象の抑制効果に及ぼすスリットインデューサのスリット位置とス リット形状について、数値解析を用いて検討した.その結果、キャビテーション不安定現象 のうち、特に旋回キャビテーションに対して、キャビティ後端とターボポンプインデューサ のスロートとの干渉が旋回キャビテーション発生の閾値とされているため、これまでスロー ト部にスリットを開けて数値解析や実証実験を行っていたが、スロートよりも上流側にスリ ットを開けた方が、より広範囲に不安定を抑制できる可能性が示された.また、スリットを 浅い切り欠き状にしても抑制効果は発現し、かつ、インデューサの昇圧性能の低下をより少 なくできることが示された.以上のように、本プロジェクトでは、実験では実施できない様々 な形状のスリットについて抑制効果を検討することができ、より有効なスリット位置と形状 を求めることができた.次年度、この最適なスリット位置および形状を実際のロケットイン デューサに加工し、JAXA角田宇宙センターで検証実験を行う計画である.

2.2 逆流返しライナの不安定抑制効果の検討

キャビテーション不安定現象,特にキャビテーションサージの抑制効果が高いとして開発 されてきた逆流返しライナについて数値解析を実施し,抑制メカニズムをキャビテーション の動特性パラメータを評価することで検討した.キャビテーションの動特性パラメータのう ち,流量変動に対するキャビティ体積変動の大きさを表すマスフローゲインファクタ M は逆 流返しライナで低下したが,圧力変動に対するキャビティ体積変動の大きさを表すキャビテ ーションコンプライアンス K は変化しなかった. M の低下はインデューサ上流方向へのキャ ビティの成長を抑制していることを指し,この抑制効果により不安定の発生が抑制されたも のと考えられる.また,逆流返しライナでは上流にキャビティが延びられない分,スロート にキャビティが延びるため,K は変化しなかったものと考えられる.よって,スロートへ延 びるキャビティと干渉するスリットと逆流返しライナを組み合わせることによって,より強 固な抑制手法となる可能性が本プロジェクトで示された.

3. 研究目標の達成状況

スリットと逆流返しの組み合わせに関する数値解析はプロジェクト期間内では未達となったため,次年度引き続き検討している.さらに段差付きケーシング等の別の抑制手法についても MK への影響を確認し,組み合わせを解析する予定である.さらに,実液推進剤の解析のための簡略化熱モデルの UDF による適用も未達であったため,次年度引き続き適用を検討している.その他の目標については有用な結果が得られており,研究目標はおおむね達成し

たと考えている.

4. まとめと今後の課題

次年度は,引き続き,キャビテーション不安定現象抑制手法の組み合わせに関する数値解析と, キャビテーションの熱力学的抑制効果を考慮した不安定現象抑制手法の検討を行う.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

 A Kowata, S Kawasaki and Y Iga, "Numerical analysis of the effect of slit shape on the performance and cavitation instability of liquid rocket inducer", IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, Volume 1037, No. 012030 (2022),

著書

該当なし

国際学会

- 1. Takuo Mino, Koki Tamura, Satoshi Kawasaki, Yuka Iga, "Numerical Analysis of Rocket Pump Inducer with Backflow Restriction Step", 11th AJCPP 2023, Ishikawa, Japan (2023)
- Shuichi ICHIKI, Shunta TSUCHIYAMA, Masaki NAKANO, Junnosuke OKAJIMA, Yuka IGA, "New Thermodynamic Parameter for Cryogenic Cavitation derived by Numerical Analysis using Simplified Thermodynamic", 11th AJCPP 2023, Ishikawa, Japan (2023)

国内学会・研究会等

該当なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

該当なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL30APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2022年7月20日提出

既存空港を利用した那覇空港を拠点とした際の離島や都市部を結ぶ飛行

車両の LES 解析

森澤 征一郎,兼久 勇人
沖縄工業高等専門学校 講師,本科生
坂井 玲太郎
宇宙航空研究開発機構 研究員
菊地 亮太
京都大学 助教
大林 茂
東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

那覇空港は日本本土とアジア諸国の中間地点に位置し、日本含むアジア主要都市を迅速に 結びつけるリージョナルハブとして期待されるとともに、沖縄県内の離島を結ぶ中継地点で もある.この離島への移動手段には、100 席以下の小型航空機で2地点を結ぶコミューター 航空会社が存在し、重要な公共交通機関となる.加えて、台風などの悪天候で船舶が就航で きないときには緊急輸送にもなる.しかし、離島間の航空路線は小規模かつ需要が限られる ため、座席当たりの運航コストが高く、構造的に採算性が低く、定期路線の維持や確保を図 ることが課題となっている.一方、近年では新たな移動手段として空飛ぶクルマなどの飛行 車両に非常に多くの期待が集まり、離島からの移動手段としても検討が進められている.本 研究では、航空機が那覇空港に離着する際に悪天候の影響を調査し、今後の緊急輸送に役立 てるとともに、飛行車両として空陸両用車を投入した場合の離島間輸送に対する利点・欠点 を明らかにすることを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本年度は、台風の有無による那覇空港に着陸する県外や県内の離島を就航する B734-300, 及び離島へ就航している DHC-8-Q100 の航空路の違いを調査する. さらには、機体成立性の 検討には必要な空力特性の算出し、空陸両用車のサイジング分析を行う. なお、サイジング 分析より求めた必要な空力特性と検討対象である空陸両用車の結果には差がある. そして、 それらの差を埋めるため高揚力装置の検討が必要であり、LES などの高忠実な流体シミュレ ーションは不可欠である.本研究では、その検討を進めるため JAXA が開発した流体シミュ レーションソフト FaSTAR の導入を行った. FaSTAR の導入にあたっては、初期検討として RANS を用いて既存翼とその空力特性の比較し、その計算結果の妥当性を確認する. さらに、 流れ場の様子を確認し、上述した空力特性の性質を捉えていることを示す.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

「空陸両用車」の実現には本研究で取り扱う機体形状,運航問題を含め多くの考慮すべき ことが複合的関連してくる.このような複合的な問題を取り扱う方法論を Multidisciplinary Analysis と呼ばれ,工学分野としても重要な位置付けをもつ.研究プロジェクト代表者であ る大林はこの分野の世界的な先駆者であり造形が深い.加えて,本研究の提案者である森澤 は所属機関と地元のエアラインで包括連携協定を結んでおり,より実問題に近いところで活 動をしている.他の研究者(坂井・菊地)らも航空分野の第一線で活躍する研究者である.その ため,本共同研究することは相互に相乗効果があり,今後の航空研究への大きな寄与が期待 できる.

2.1 那覇空港に離発着する県外及び県内離島便の運航分析

本節では、台風の有無による那覇空港に着陸する県外や県内離島として観光化された石垣 島・宮古島などに就航する B734-300,及びそれ以外の小規模な離島へ就航している DHC-8-Q100の航空路についてそれぞれの違いを調査する.図1に2016年9月13~20日 における台風の進路,那覇空港近傍で観測した位置と風向の定義,さらには2015年(台風 の発生なし)と2016年(台風の発生あり)での9月17日の風速値・風向に対する時間変化 を示す.9月17日を選択した理由は、図1(a)で示す進行中の台風が最低中心気圧の最小値を 示したためである.その結果、図1(c)より台風が発生した2016年での風速は21時を除いて 風速 8m/s以上の風が生じ、その向きも南東から南方向を示している.なお、風速8m/sと いうのは一般的に追い風成分の閾値に利用され、その閾値を超えた場合は離陸及び着陸が禁 止となる.

以上を踏まえて、台風の有無による那覇空港に着陸する B734-300,及び DHC-8-Q100の 航空路の違いを図 2 及び図 3 に示す.図 2 より B734-300 による航空路に関して、台風が発 生した 2016年の進路は北側からの着陸であるのに対して 2015年の進路は南側からの着陸と なり、両年で逆転している.これは上述した図 1(c)について、追い風成分が 8m/s を超えた ことによる着陸制限が関係し、両年で着陸する際の進行方向が逆転した要因の 1 つだと考え られる.加えて、台風が発生した 2016年はそうでないで 2015年と比較して、航空路を示す 線の数も少なく、減便していることからも台風の影響を受けていることがわかる.加えて、 台風が接近している 2016年の航空路の方が 2015年の航空路よりバラツキが少ない.これは、 気象の影響により航空路が制限された結果、航空路が狭くなったと考えている.

また、図3よりDHC-8-Q100による離島便を見た場合、2016年の与那国島・石垣島からの航空路がなく、欠便している.これは図1(a)で示す台風の進路そばであることから欠便し

たと考えられる.一方で,台風進路から離れている奄美諸島の大島及び大東諸島の南大東島 からも欠便となっている.この点については現在調査中である.



(b) 観測位置と風向の定義
 (c) 観測した風速と風向の分布
 図1: 台風の進路,及び那覇空港付近での風速と風向



図2:着陸時の航空路(B734-300)



2.2 空陸両用車のサイジングと高揚力装置の検討に向けて

次に,機体成立性に関するサイジング分析に関する結果を述べる.図 4(a)に既存の自動車用 エンジン,及び軽飛行機エンジンを調査した.その結果,両者のエンジンの重量と出力は同様 の傾向を示した.本研究では陸路を走行することも想定していることから間欠な作動条件も必 要である.この点から利用する自動車用エンジンの上限値・下限値をサイジング実施する制約 条件とした.

次に、上述した制約条件、及び離陸・巡航・着陸といった飛行機に必要な基本条件を満たす 空陸両用車に関するサイジングを行う.図4(b)にその結果を示す.図4(b)より空陸両用車にお いて自動車用のエンジンでも辛うじてサイジング分析の結果において機体成立性を示した.そ して、この結果より必要な主翼面積、エンジンパワー、離陸時及び着陸時に必要な揚力係数 (*C*_{LmaxL})、有害抗力(*C*_{D0})の算出した.

以上,サイジング分析の結果を踏まえて,特に *CLmaxLTO*, *CLmaxL*に関して本研究が対象とした空陸両用車の形状を変更させた際の空力性能の結果とサイジング分析の結果より算出した際に必要な最大揚力係数の差を示すことで,高揚力装置の検討に繋げる.図5に両者の比較結果を示す.図5の検討には計算コストを考慮し,パネル法を用いた.さらに,その結果,図5よ

りサイジング分析の結果とパネル法によるパラメトリックスタディの結果には CLmaxLTO で 1.267 の不足結果となった. そこで,不足した揚力係数を補う高揚力装置の検討を進める. 検 討にあたっては、 JAXA が開発した流体シミュレーションソフト FaSTAR を用いる.

本年度は、この検討を行うにあたって、既存の翼型に関する実験データを対象に FaSTAR に よる計算環境の構築を行い、実験データと RANS 計算による結果の比較を行った. 図 6 に NACA0012 翼型の実験データとの空力特性の比較結果を示す.図6より実験データと比較する と失速後の空力特性に違いがあるが、サイジング分析に必要な最大揚力係数の予測という点で 大きく外れていないと考え、ある程度の予測可能と考えられる.

加えて、それらの空力特性に対応させて、RANS 計算による流れ場の様子を確認する. 図7 に迎角の違いによる流れ場を示す.図7より迎角が大きくなるに伴い、剥離領域が後縁より前 縁方向に広がっていることがわかる. そして, 迎角 20°では完全に翼面上から完全に剥離して おり,NACA0012 翼型の特徴である後縁失速の様子を捉えることができた。今後は、上述した 不足した揚力係数を補うため高揚力装置の検討を進めていく.



及び軽飛行機エンジン性能

(b) サイジング分析の結果

図4 空陸両用車のサイジング分析の結果



空陸両用車のパラメトリックスタディとサイジング分析による結果差 図 5



図6 NACA0012 翼型の空力特性を比較した結果



図7 迎角の違いによる RAN 計算の流れ場

3. 研究目標の達成状況

台風の有無による那覇空港に着陸する県外・県内の離島を就航する B734-300, 及び離島へ就 航している DHC-8-Q100 の航空路の違いを調査し, 各機体についての航空路の違いを抽出する ことができた. さらには, 機体成立検討に向けて自動車エンジンを搭載した空陸両用車のサイ ジングを実施し, 現在の空陸両用車における不足した空力特性を定量化できた.

加えて,昨年度コロナ禍の影響で地元の航空関連企業を訪問し,運航支援者と意見交換する 中で沖縄固有の気象条件などを教示して頂くなど有意義な時間を得た.来年度以降も同様の活 動を継続していく予定である.

4. まとめと今後の課題

本研究で実施した内容は2つあり、1つ目は那覇空港に着陸する県外や県内離島に就航している B734-300,及び離島にのみ就航している DHC-8-Q100の航空路における台風が接近した場合とそうでない場合の違いをそれぞれ調査した.2 つ目は、機体成立検討に向けて自動車エンジンを搭載した空陸両用車のサイジングを実施した.

その結果,航空路に関して台風が発生した場合の B734-300 が着陸する際,進路が南北逆転 するとともに,進路のバラつきが少なくなった.そして,台風が発生した場合の離島から飛行 する DHC-8-Q100 は台風が接近していたために欠便していたとともに,台風進路から離れてい る奄美諸島の大島及び大東諸島の南大東島からも欠便となっていた.

加えて、空陸両用車のサイジングでは必要なエンジン性能や主翼面積、そして離着陸に必要な空力係数を算出した.そして、空陸両用車の形状を変更させた際の空力性能の結果とサイジ

ング結果より算出した結果を比較することで不足している最大揚力係数の差を明らかにした. 今後は、高忠実な流体シミュレーションソフト FaSTAR による LES 計算や風洞実験を通して 高性能な高揚力装置の検討を進めていく.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

- S. Morizawa, H. Kaneku, R. Sakai, R. Kikuchi, and S. Obayashi: Feasibility study on a roadable aircraft to connect Okinawa's remote islands, The 1st KOSEN Research International Symposium, (2023), C-O-6-2.
- [2] S. Morizawa, R. Sakai, R. Kikuchi, and S. Obayashi: Development Study on an Air Transportation System with a Roadable Aircraft among Remote Islands, and Major Cities around Okinawa, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, (2022), CFR-56.

国内学会・研究会等

- [1] 兼久勇人, 森澤征一郎: 沖縄近隣の離島間における空陸両用車実現に向けた機体形状のサ イジングの実施, (2022), 第 60 回飛行機シンポジウム, 1C20.
- [2] 森澤征一郎, 新垣朝啓, 菊地亮太, 坂井玲太郎: 台風が那覇空港の航空運航に与える影響 調査, (2022), 第 60 回飛行機シンポジウム, 1B04.
- 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL32APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月13日提出

埋め込み境界法を応用した数値流体解析の高度応用

大林 茂

東北大学流体科学研究所 教授

高橋 俊

宇宙航空研究開発機構 主任研究員

(前 東海大学工学部機械システム工学科 准教授)

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

衝撃波と微粒子が干渉する圧縮性固気混相流については様々な物理現象との関連性から古く から研究が継続されており、近年では数値解析技術の高度化に伴って様々なメカニズムが解 明されつつある.中でも Euler-Euler 的な数値解析手法を応用した研究を実施している研究 者は国内外で増えつつあり、特にフロリダ大学の Balachandar のグループなどは世界的にも 最先端の研究を進めている.本研究グループは彼らとの差別化を行いながら新たな物理を基 礎的な観点から調査する.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では衝撃波により移動する多数の粒子周りの運動連成解析を実施して,運動する粒子 と衝撃波に生じる減衰の影響について明らかにする. 圧縮性混相流の基礎物理の解明に向け て,埋め込み境界法を応用して衝撃波と干渉する少数の粒子のクラスタリングの傾向の有無 を明らかにする.

- 2. 研究成果の内容
 - 2.1 新しい解析手法の開発

埋め込み境界法を応用した移動物体周りの解析手法を開発し、相対移動する粒子周りの流体 運動連成解析を実施した.また基礎的な検証問題では先行研究の実験結果と比較を行って定 量的な一致を示した.

2.2 新しい現象の解明

少数の粒子が衝撃波と干渉する現象については過去にも例があるが、粒子の移動を含めた数 値解析による検討例は過去に例が無い.我々はその点に着目して少数の粒子が衝撃波と干渉 して生じる空力現象を明らかにした.

3. 研究目標の達成状況

目標であった衝撃波により移動する多数の粒子周りの運動連成解析を実施して、粒子の運動と 衝撃波に生じる減衰の影響について明らかにした.具体的には圧縮性混相流の基礎物理の解明 に向けて、埋め込み境界法を応用して衝撃波と干渉する少数の粒子のクラスタリングの傾向の 有無を明らかにして学術論文として報告した.

4. まとめと今後の課題

より高マッハ数における基礎物理を調査するため,超音速,極超音速領域での流れ場の数値解 析を実施して,物理現象の傾向調査を行う.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

[1] Takahashi, S., Nagata, T., Mizuno, Y., Nonomura, T., & Obayashi, S. (2022). Effect of particle arrangement and density on aerodynamic interference between twin particles interacting with a plane shock wave. Physics of Fluids, 34(11).

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 無し

書式 (1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL33APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第1回報告

2023年7月20日提出

原形質流動における Brown 運動の 2D 及び 3D シミュレーション

内一 哲哉 東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

シャジクモなどの水中植物細胞の原形質流動は、ミヨシ ンと呼ばれる分子モーターによって駆動され、これは動物 細胞の中の物質移動の駆動原理と同じであることが明らか になり、多くの研究者の注目を集めている。植物細胞では、 40年ほど前になるが、生体物質の Brown 運動が実験的に 確認された。しかし、この生体物質の Brown 運動が原形 質流動に果たす役割については、明らかにされていない。

本研究では、Navier-Stokes 方程式に揺動力項を取り入 れた Langevin Navier-Stokes (LNS)方程式を用いて, 生体

物質の Brown 運動が流動場に与える影響を明らかにする。これにより, Brown 運動が生体 物質の混合促進に与える影響を研究する[1]。

1.2 研究期間内の最終目標

水中植物の細胞の大きさは,直径が数百~1(μ m)程度と小さく,流れの速さは数十~100(μ m/s)程度で低速であり,粘性は水の100倍程度と大きいため,レイノルズ数は0.00025程度と非常に低い。その原形質流動は、図1のように細胞表面で駆動される。細胞表面にはindifferent zone と呼ばれる z 軸から少し傾いた速度ゼロの領域が存在し,その両側では流体は逆方向に流れる。この indifferent zone の傾きにより,内部の流体は回転循環する。この流れ場の回転循環は混合促進のためとされているが,更に物質のBrown 運動の影響が加わると,混合促進はどうなるのか?そもそも,生体物質のBrown 運動は流れ場に影響を与えるのか?について明らかにする。

研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 2.1 本申請研究の意義

水中にある物質の Brown 運動は、水のマクロな流れに比べ非常に速いため、通常は Brown 運動する物質と流動場は別々に考え、物質と流れ場の相互作用をとおして、物質の Brown 運 動が流れ場に影響を与えるとして取り扱う。このような立場からの Brownian dynamics と 呼ばれる多くの方法があり、実際の問題に適用されてきた。格子ボルツマン法なども NS 方 程式そのものではないが、この Brownian Dynamics に含まれると考えられる。一方、本研 究の LNS シミュレーションの方法では、流れ場そのものが揺らぐと考える。この方法は揺動 力を含んだ Landau-Lifshitz の流体力学方程式と等価である。従って、LNS シミュレーショ ンの方法では、統計力学的な取り扱いが必要となり、物理量の計算では流れ場の平衡状態に おけるその平均値を求める必要があるため、計算量が増えてしまう。このため、普通の方法 に比べると大きな体系での計算が困難になる。一方において、LNS シミュレーションの方法 では物質は仮定しないので、流体と物質の相互作用を考慮する必要がないために、Brown 運 動する物体の流動場に対する影響を直接見積もることができる。そもそも、物質の Brown 運 動の起源は水分子の熱揺らぎ運動であり、水分子の運動が水中の物質を乱雑に動かしている のである。従って、Brown 運動の効果を見るために、流動場に熱揺らぎの効果を取り入れる Landau-Lifshitz の考え方に基づいて、流動場を統計力学的に取り扱うことは、むしろ自然 な方法といえる。



図 2 レーザー光で測定された速度分布(横軸は速度に対応): (a) 2 つのピーク値を持つ 速度分布, (b) 一つのピーク値を持つ速度分布¹

図 3 計算に用いた 3 次元格 子:(a) indifferent zone に 60°の 傾きを仮定(Lattice A:回転循環あ り),(b) indifferent zone に傾きな し(Lattice B:回転循環なし)



¹ R. Mustacich and B. Ware, Boiophys. J. 16, 373-388 (1976); 17, 229-241 (1977).



図 4 格子 A (lat A)と格子 B (lat B) の断面における流れ場の Snapshots

図4に,格子断面の速度と圧力の snapshots を示す。揺動力の大きさDが大きくなると,流れが 乱れていくことが分かる。



図 5 (a)格子 A (lat A)と(b)格子 B (lat B)で計算した z 方向速度の分布

図 5 に z 方向の速度分布の揺動力 D 依存性を示す。どちらの格子でも D=100 前後で,図2 に示 した実験結果を再現していることが分かる。図中の expt は,計算結果が実験データを再現してい る D の範囲を示す。

図 6(a)には, 混合促進に対する Brown 運動の影響を見るために, 速度の最大値 (Vz と V) の D 依存性を 2 つの格子について示す。Vz に関しては D=20 付近で格子 A の方が大きくなっていることが分かる。V に関しても, 格子 A の V が格子 B よりも D=20 付近でその大きさの違いが顕著になっている。これらのことから, indifferent zone の傾きばかりでなく Brown 運動も, 混合促進に寄与していると考えられる。

図 6(b)には、z 方向と V 方向への速度の絶対値を使った「絶対値平均流量」(単位時間単位断面積 をとおして移動する流量の絶対値)を示す。絶対値を使う理由は、植物細胞内では流体は循環し ているため速度は1方向にはならないためである。z 方向に関しては、回転循環している格子 A の絶対値平均流量は低いものの、V 方向に関しては、格子 A では D とともに増加して、D=100 程度になると格子 B とほぼ同じになることがわかる。これらの結果から、D=0 の Brown 運動が ない場合には z 方向も V 方向も格子 B の流量が大きいことを考えると、回転循環がある場合には Brown 運動の混合促進へ影響が有効的に働くことが分かる。



図 6 (a) Vz と V の最大値の D 依存性, (b) z 方向と V 方向への絶対値平均流量の D 依存性

3. 研究目標の達成状況

達成状況としてはおおむね良好と考えている。当初の目的である:(i)原形質流動における生体 物質の Brown 運動に関する速度分布の実験データの再現,(ii)その Brown 運動の混合促進への影 響,に関して,ほぼ予想どおりの結果が得られた。(i)に関しては,速度のz方向成分 Vzの分布が, 実験データを D=100 前後でよく再現すること,(ii)に関しては,回転循環がある場合には Brown 運動の混合促進へ影響が有効的に働く,ことなどが分かった。

4. まとめと今後の課題

本研究では、水中植物細胞内の原形質流動を対象に、その生体物質の Brown 運動を Langevin Navier-Stokes (LNS) 方程式で解析した。この LNS 方程式は揺動力を含む Landau-Lifshitz の Navier-Stokes 方程式に対応する。生体物質の Brown 運動は水分子が衝突することで起こる。一方、生体物質はミヨシン分子モーターから運動エネルギーを獲得するが、その獲得した運動エネルギーは水分子との衝突で水中に散逸する。このときの生体物質の Brown 運動とそのエネルギー 散逸の関係は「揺動散逸定理」として知られ、Brown 運動における揺動力の大きさ D と水の粘性の関係を与える。数値計算において仮定した D の大きさに関して、速度分布の実験結果を再現する D=100 という値は Landau-Lifshitz の仮定した揺動散逸関係式から求まる D の値とほぼ一致していることが確かめられた。このことは、この研究で用いた LNS シミュレーションの方法が、これまで試みられたことがなかったにも関わらず、統計力学的に見ても妥当な方法であることを support するものと考えられる。

本研究では拡散や粘性は等方的と仮定したが、一般に生体物質の形は等方的とは限らないため、 流体の粘性や拡散もその異方的な形状に影響を受けて方向依存になる可能性がある。LNS 方程式 は生体物質なしで生体物質の Brown 運動を記述するものであるから、この枠組みを、等方的とは 限らない生体物質を含んだ流動現象へ適用することなどが今後の課題となる。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

[1] Shuta Noro, Satoshi Hongo, Shinichiro Nagahiro, Hisatoshi Ikai, Hiroshi Koibuchi, Madoka Nakayama, Tetsuya Uchimoto, and Gildas Diguet: Langevin and Navier-Stokes Simulations of Three-Dimensional Protoplasmic Streaming and a Nontrivial Effect of Boundary Fluid Circulation, Preprint submitted to Elsevier: <u>http://ssrn.com/abstract=4469833</u>

著書

国際学会

国内学会・研究会等

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL35APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

次世代液化燃料の噴射過程に関する研究

大島 逸平 東北大学流体科学研究所 助教 川原田 光典 交通安全環境研究所 研究員

- 1. 研究の目的と目標
- 1.1 研究の背景と目的

低炭素社会の実現にむけて、燃料アンモニアや各種合成燃料は社会を支えるエネルギー分 野で次世代燃料として注目されている.それらはエネルギー分野の大型内燃機関のみならず、 輸送分野の小型内燃機関にも活用することが可能である.アンモニアの液化特性はプロパン やブタンなどを主成分とする LPG と近く、燃料噴射系において液相から気相への相変化が容 易に発生する.そのためインジェクタ内で生じるキャビテーションや噴孔でのフラッシュボ イリングなどの現象が初期の噴霧形成に強く影響を及ぼすものと考えられる.しかし噴射時 のインジェクタ内流動やインジェクタ近傍での噴霧形成過程の可視化・光学計測は容易でな いため、噴射過程およびその後の噴霧形成過程について十分に理解されていない.そこで本 研究では、液化特性が近くアンモニアを用いるエンジンのベースとなりうる LPG エンジンの インジェクタおよび燃料噴射系をモデル化し内部流動の数値解析を行う.これにより相変化 が容易に起こり得ることの数値解析への影響や既存数値モデルの適用について検討する.将 来的には噴射量や噴射周期等の作動条件を変化させて数値解析を実施し、相変化の影響の把 握や初期の噴霧形成モデル構築につなげる.

1.2 研究期間内の最終目標

アンモニアの噴射過程における相変化の影響について数値シミュレーションによって把握 することを本研究期間内の目標とする.

- 2. 研究成果の内容
 - **2.1** 共同研究の意義

内燃機関は、小型高速や大型低速機関など用途に応じた構造の違い、連続燃焼や間欠燃焼、

火花点火や圧縮着火といった燃焼方式や着火方式の違い,予混合燃焼や拡散燃焼といった燃焼形態の違いがあるなど,多岐にわたる.しかしいずれも狙ったタイミングで燃料供給を行うことが重要であるため,燃料噴射系については共通した課題がある.本共同研究は内燃機関の種別によらずアンモニアを利用する際に問題となる燃料噴射系における液相から気相への相変化の影響を把握することを目的としており,ガスタービンエンジンなどを対象とする東北大学流体科学研究所と自動車用エンジンを対象とする交通安全環境研究所の双方にメリットがある.さらに燃料噴射系における相変化の現象把握が進めば,より多くの内燃機関への幅広い適用が考えられる.

2.2 数値実験内容と結果

小型エンジンに燃料アンモニアを利用した研究として、国際エネルギー機関(IEA)で実施 されたコラボレーションプログラムのレポートなどがあるものの、いずれも運転条件が限ら れる. さらにこれらの研究は主として燃焼に着目しており、燃料噴射/混合気形成は十分に検 討されていない. アンモニアは、噴射時に急激な相変化が生じると燃料物性から想定される ため、従来の液体燃料噴射制御技術をどの程度流用できるのか不明である.そこで本年度は、 アンモニアを液体用インジェクタで噴射する場合を想定し、既存の数値解析モデルを用いて 急激な相変化作用により気泡生成現象が確認された既報のn-pentaneを用いた実験と同条件 の噴射圧 0.5MPa,液体温度 56℃において噴射過程の数値実験を行った.その結果、噴孔出 口直下の液相挙動は定性的に再現できていた一方で、ノズル出口での気泡生成状況に大きな 差異が確認できた.従来のキャビテーションモデルをそのまま用いてノズル内部の相変化を 予測することは難しいことが確認された.その後流体をアンモニアに変更し数値実験を行っ たところノズル内での過剰な相変化が見受けられた.今後実験結果との比較やモデルの検討 が必要である.

3. 研究目標の達成状況

燃料アンモニアを小型エンジンにて利用する際に問題となる燃料噴射系における相変化の噴 射過程への影響を明らかにすべく,まずは既存のキャビテーションモデルを用いた数値解析を 行った.その結果,特にノズル出口付近の相変化の状況について数値解析と実験で大きく異な った.最終的な成果となるエンジンの運転条件に対する噴霧形成の予測モデルにむけて,その 基礎となるキャビテーションモデルの問題点や考慮すべき点について整理することができた. 現状把握や問題点の整理等,最終目標にむけて初年度に実施すべき内容は達成できているもの と考える.

4. まとめと今後の課題

飽和蒸気圧が高く、相変化が起きやすい燃料を用いてノズル内部の可視化実験を行った例が 少なく、実験結果と既存のキャビテーションモデルを用いた解析結果との比較が少ないことか ら、燃料温度と雰囲気圧力を変化させて行われた実験結果と既存のキャビテーションモデルを 用いた数値解析の結果を比較した.その結果、噴孔出口直下の液相挙動は定性的に再現できて いた一方で、ノズル出口での気泡生成状況に大きな差異が確認できた.従来のキャビテーショ ンモデルをそのまま用いてノズル内部の相変化を予測することは難しいことが確認された.一 方,相変化の起きやすい水素やアンモニアにおいてはノズル内部の相変化を適切に予測するこ とが特に重要であるため,壁面との摩擦や熱の影響などを考慮した改良モデルを検討する必要 がある.このため引き続きノズル内部の実験結果に関する文献を調査する.また,実験条件は 限られるものの拡大ノズルを用いた可視化実験について装置の検討を行っており,この実験に より得られた結果を先述のキャビテーションモデル改良の際に基礎データとして用いていきた い.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

国際学会

Noritsune Kawaharada and Ippei Oshima: Study on the Injection Process of Next-Generation Liquified Fuels, *Proceedings of the Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information*, Sendai, (2022), CRF-16, pp. 1-2.

国内学会・研究会等

川原田光典,大島逸平:液体アンモニア噴射におけるノズル内部流動に関する数値解析,日本 液体微粒化学会第 31 回微粒化シンポジウム講演論文集, (2022), pp. 1-4.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01MAY22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年07月25日提出

太陽電池性能向上に向けた未結合手終端機構および結晶構造の

分子動力学的解析

徳増 崇 東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - **1.1** 研究の背景と目的

結晶シリコンヘテロ接合型太陽電池 (Silicon Heterojunction Solar cells : SHJ) は省資源 かつ高効率な太陽電池であり、カーボンニュートラルに貢献する太陽電池として期待されて いる. SHJ には,主発電層の結晶 Si (c-Si) 表面原子がもつ未結合手 (Dangling Bond: DB) 等の欠陥を低減する保護膜として, 真性水素化アモルファス Si (i-a-Si:H) 薄膜が用いられて いる.SHJの性能は、i-a-Si:H 薄膜中の水素原子による DB 終端、熱処理に伴う薄膜の結晶 化によって影響される.また,i-a-Si:H 膜は 10 nm 以下と非常に薄く,実験的な解析は困難 である. その為我々は, 動力学と化学反応を考慮したシミュレーションを行い, i-a-Si-H 薄膜 中での水素原子の DB 終端機構、及び薄膜の結晶化機構解明を目指すと共に、SHJ の性能向 上に向けた製造条件の最適化を最終目的とする.手法に関して,水素原子による DB 終端, 結晶化といった化学反応を再現するためには、第一原理計算に基づいた量子化学的手法を用 いることが一般的である.しかし、本研究で解析しようとする数10nm 程度の比較的大規模 な系において、量子化学的手法によって結合情報を考慮した解析を行うことは計算コストの 観点から困難である. そこで本研究では,反応性力場(Reactive Force-Field: ReaxFF)を 用いた分子動力学(Molecular Dynamics: MD)法によって解析を行う. 薄膜材料では原子 スケールの現象が物性に大きく影響する場合が多い.反応性を考慮した薄膜材料の分子動力 学的解析手法の確立は、薄膜分野全体に大きな影響を及ぼすため、工学的に大変価値のある 研究であると考えている.

1.2 研究期間内の最終目標

MD法を用いてi-a-Si:H/c-Si構造の模擬を行い,熱処理過程をシミュレーションすることで, i-a-Si:H の結晶化,水素原子の拡散といった構造特性の変化を解析する. これによって i-aSi:Hの結晶化機構を理解することを研究期間内の最終目的とする.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

共同研究を行う名古屋大学の宇佐美・黒川研究室では、様々な実験装置を用い、計算科学 を援用した太陽電池研究を行っている.しかし、MD 法などの原子スケールで解析可能な手 法を用いた研究は前例がなかった.本共同研究によって、徳増研究室が持つ分子動力学計算 に関する知見を用いたシミュレーションを基に、宇佐美・黒川研究室が持つ太陽電池デバイ スの作製に関する知見を組み合わせることで、材料計算科学として非常に意義がある研究が 行えると考えている.

手法について,対象とする i-a-Si:H 薄膜は 10 nm 程度と非常に薄いが,シミュレーション で製膜過程を経て再現することは計算負荷が非常に高くなる.その為,本研究では,温度制 御によって溶融させた Si を急冷することでアモルファス構造を得る手法である,メルトクエ ンチ法を用いて i-a-Si:H/c-Si 構造を模擬した.また,模擬した構造に対し低温熱処理を行う ことで,i-a-Si:H 薄膜が結晶化する過程,薄膜中で水素原子が拡散する過程を解析した.現在 は i-a-Si:H が持つアモルファス構造をより実際の系に近づけるための計算に取り組むと共に, i-a-Si:H の初期構造,水素分布を変化させ,異なる初期条件,熱処理条件で計算を行うこと で,欠陥が少なくなる条件について探索を進めている.

3. 研究目標の達成状況

メルトクエンチ法を用いた i-a-Si:H/c-Si 構造の模擬を行った. アモルファス材料に特徴的な, 動径分布関数による構造特性が先行研究で実験から得られたデータとも一致しており,計算 の妥当性が確認されたと考えている.熱処理中の i-a-Si:H/c-Si 構造で, i-a-Si:H が結晶化し た比率を定量化し,膜中の水素原子分布が結晶化に与える影響を定性的に理解した.これに より, i-a-Si:H が結晶化する過程には,水素原子の拡散,膜からの脱離が影響していることを 明らかにした.

4. まとめと今後の課題

メルトクエンチ法を用いることによって、実際の系に近い i-a-Si:H/c-Si 構造の模擬を達成した.また、熱処理過程での i-a-Si:H 薄膜の結晶化や薄膜中水素原子の拡散といった現象を再現すると共に、i-a-Si:H が結晶化する過程に水素原子が与える影響を理解した.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

特になし

著書

特になし

国際学会

1. **K. Inoue**, N. Uene, K. Gotoh, Y. Kurokawa, T. Tokumasu, N. Usami, [Numerical simulation study for analysis of hydrogenated amorphous silicon/crystalline silicon

heterostructure by reactive molecular dynamics method $\,]\,$, $\,$ $\,$ $\mathbb{5}0^{\mathrm{th}}\,\mathrm{IEEE}$ Photovoltaics Specialists Conference (PVSC 50) $\mathbb{J}\,$, Puerto Rico, USA, June 2023

国内学会・研究会等

 K. Inoue, N. Uene, K. Gotoh, Y. Kurokawa, T. Tokumasu, N. Usami, 「水素化アモル ファスシリコン/結晶シリコンヘテロ構造の解析に向けた反応性力場分子動力学法によ る数値シミュレーション研究」, 『第 70 回応用物理学会春季学術講演会』, Tokyo and Online, Japan, March 2023

5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等) 特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01JUN22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月21日提出

脳血管画像に基づく流れ場推定手法の開発

安西 眸 東北大学流体科学研究所 助教 杉山 慎一郎 仙台広南病院 部長

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

脳動脈瘤の有病率は約5%と高く、その病態には血流が大きく関与する.しかし、既存のCFD 手法では前処理を含む計算過程に多大な時間を要し実臨床への応用は難しい.血管疾患に関 する疫学的なエビデンスを得るためには数万例の症例を解析する必要があり、そのためには CFD の手間暇と計算時間というボトルネックを解決する必要がある.そこで本研究では、血 管形状を表す医療用画像とCFD 解析結果のペアを学習した深層学習ネットワークを構築し、 世界初となる深層学習による脳血流推定ネットワークの開発を目指す.提案するネットワー クが開発されれば、これまで数時間~数日かけて作業者が行ってきた CFD 解析が数秒で完了 するようになり、上記ボトルネックを大幅に改善することになる.

1.2 研究期間内の最終目標

本年度は学習データ作成を主目的とする.臨床画像データ収集ならびにその CFD 解析を行う.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 臨床画像データ収集

仙台広南病院倫理委員会の許可のもと、日常診療において撮影された血管造影画像を後方視的に取得した.右内頚動脈に動脈瘤を有する症例 61 例の断層画像を取得し、そのうち血管の3次元再構築およびメッシュ生成が可能な症例に対して CFD 解析を行った.

2.2 臨床画像データから再構築される実血管動脈瘤形状に対する CFD 解析 各患者形状に対して、血管の平均壁せん断応力が 1.5Pa になるよう、入口断面から流量を推 定し、速度境界を与えた. 複数の出口境界に対し、直径の2 乗に応じて流量を分配し、定常 計算を行った.

3. 研究目標の達成状況

造影画像に対し手動で血管のセグメンテーションを行った結果, 51 症例に対して内頚動脈および前大脳動脈および中大脳動脈を含む動脈瘤周辺領域を 3 次元サーフェス情報として再構築が可能であった. 再構築された全ての動脈に対し CFD 解析を行った結果,計 51 症例の医療画像および血流場データが収集された.得られた血管の平均入口直径は 4.44±0.48 mm であり,先行研究における臨床報告の直径の範囲と同等であった. しかしながら動脈瘤位置,形状,サイズは様々であり,深層学習において親血管領域・動脈瘤領域で学習データのばらつき度合いは大きく異なると考えられる. 今後全症例の流れ場を部位別に評価し,その範囲とばらつきを定量することが必要であると考えられる.

また,特に巨大動脈瘤において CFD 解析における残差の収束に時間を要する症例が見られた. これに対し,繰り返し計算の安定化と早期収束を目的とし,複雑形状における初期流れ場とし て深層学習による推定流れ場を設定する検討を行った.先行研究として開発した大動脈におけ る流れ場推定深層学習ネットワークを用い,大動脈合成データ形状に対し流れ場を推定した. 推定された流れ場を CFD の初期流れ場として入力し,繰り返し計算における残差変化と収束性, 最終的な流れ場を評価した.深層学習による流れ場を初期流れ場として CFD 解析を行った結果, 繰り返し計算開始時の残差変化が穏やかになり,計算収束に要する繰り返し回数が低減した. 最終的な流れ場は初期条件として全領域速度ゼロを与えた場合と同等であった.本年度の検討 は大動脈における推定流れ場を用いたため,今後は脳動脈を用いた検討を行う必要がある.

4. まとめと今後の課題

本年度は学習用データの生成のため,臨床データに対する CFD 解析を行った. 深層学習ネット ワークの構築,またその強化学習のためには学習データとなる CFD データが必要であり,また データセット構築の加速が必要である. 今後は得られたデータセットの評価および,ネットワ ークの構築,さらに CFD データ取得の加速化手法の構築を進める.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む) 該当なし

該当なし

著書

該当なし

国際学会

該当なし

国内学会・研究会等

令和 4 年度卒業研究 ディープラーニングを用いた数値流体力学解析の初期条件設定に関する研究 (Study on Initial Condition Setting Using Deep Learning for Computational Fluid

Dynamics), 柴田和樹

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL04JUN22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.06 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

壁面近傍における液滴流動機構

大島 逸平 東北大学流体科学研究所 助教 斎藤 寛泰 芝浦工業大学工学部 教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

蒸気タービンでは,静翼列において圧力エネルギを運動エネルギに変換するため,タービン後段において凝縮により液滴が生じる.このような凝縮相の発生は,いわゆるドレンアタック(液滴の衝突によるエロージョン)による機器損傷の原因になることが知られている. タービン翼列内における液滴の飛行経路や,液滴付着位置,エロージョンについてはこれまで多数の研究が報告されているものの,翼面での水滴のスプラッシュ現象や翼後縁での水膜 微粒化現象については十分な研究がなされていない.

静翼列ではタービン半径方向に速度分布をもち,翼面近傍の液滴は,変形や回転など,複 雑な挙動をしていると想定される.実際に,我々が以前に行った風洞実験において,変形・ 回転する液滴と壁面との衝突現象が観測されており,凝縮相の後段翼や壁面への衝突は,球 状液滴と壁面の単純な衝突だけではないと考えられる.

しかし、このような状況を実験的に再現することは難しく、さまざま条件下での液滴衝突 実験の実現には至っていない.特に、回転する液滴と壁面との衝突は、物理現象としても興 味のあるところである.そこで本研究では、翼面近傍での回転液滴の挙動を明らかにする試 みとして、まず、液滴に任意の回転を加えることができる実験手法について検討し、その実 証を行う.次に、液滴の回転条件を同定したうえで、数値シミュレーションを行い、回転液 滴の詳細なふるまいを明らかにすることを最終的な目的とした.

1.2 研究期間内の最終目標

まず,液滴に対して回転を任意に加える実験手法を確立し,そのうえで回転する液滴の壁 面への衝突現象を実験的に調べる.実験をもとに定めた条件において,液滴のスプラッシュ 現象を数値シミュレーションにより再現し,現象への理解を進める. 2. 研究成果の内容

2.1 回転液滴の衝突実験手法の開発

本年度は滴下した液滴に任意の回転を加えるため、新たな実験方法の検討を行った.風洞 の流れ場中で液滴をリリースする方法の工夫など、いくつかの方法を試したが、再現性に乏 しく、液滴自身の転がり運動を利用する方法を考案し、検討した.

実験装置の模式図を図1に示す.シリンジから液滴を撥水加工した「雨どい」に滴下し, 撥水面で液滴の挙動を制御した. 撥水面で液滴が回転しているかどうかを確認するため,液 中に微粒子(黒鉛)を混入させ,雨どい出口から放出される液滴挙動を高速度撮影した. 雨 どいの傾斜角が15度における液滴の回転の様子を図2に示す.赤丸で示す黒鉛が時間経過 に伴い,回転していることがわかる.



次に、雨どいの傾斜角が 10 度, 30 度における回転液滴の飛行軌跡を図 3 に示す. 雨どい 傾斜角を一定にして,液滴径はほぼ均一に制御されているにも関わらず,液滴の飛行軌跡にば らつきが生じた.これは,液滴の滴下位置や雨どいの表面性状のわずかなズレが液滴速度や回 転数に影響を与えてしまい,完全に同一な実験条件にはなっていないのではないかと考えら れ,改善が必要である.しかしながら,飛行液滴に回転を与えること自体には成功しており, 装置の精度を上げるなどさらに工夫すれば,再現性の向上が図れるものと考えている.



(a) 雨どい傾斜角: 10 度



(b) 雨どい傾斜角: 30 度



3. 研究目標の達成状況

本研究期間では、液滴に対し、意図的に回転を加える方法を検討し、考案した実験方法の有 用性を確認することができた.しかし、液滴の回転角速度設定と飛行軌跡の再現性が十分に確 保できておらず、系統的実験に至っていない.そのため、数値実験を行う上で必要な条件の洗 い出しや実験データの取得を研究期間中に終えることができず、回転液滴の壁面衝突現象に 対する数値解析を今年度中に実施することができなかった.

4. まとめと今後の課題

本研究では、液滴に能動的に回転を加えることを可能とする実験方法を検討した.次に、検 証のため実験装置を作成し、液滴が実際に回転しながら実験装置から放出されることを確認 することができた.現時点では、液滴の回転数の定量化にまで至っていないため、今後は実験 装置から放出される液滴の角回転速度の計測方法を検討したうえで、滑走区間に対応する液 滴回転数や液滴速度の予測式を実験、理論の観点から導く.そのうえで、可視化および海面捕 獲法を用いた数値実験をもとに各回転数、液滴速度に対応した壁面における液滴スプラッシ ュ特性を明らかにする.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- なし
- 著書
- なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし
書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01JUL22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.7 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

慣性移動を伴う懸濁液流れの実効粘度評価に向けた数値シミュレーション

船本 健一 東北大学 流体科学研究所 准教授 福井 智宏 京都工芸繊維大学 機械工学系 准教授 川口 美沙 東京農工大学 特任助教

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

マイクロプラスチックの効率的な回収や懸濁液流れの流動抵抗低減の実現には、管内流れ における懸濁液の実効粘度の理解が必要となる.しかし、一般的にレオロジー評価に用いら れるレオメータをはじめとする粘度評価は、せん断もしくは伸長流れである.そのため、流 路内流れにおける粒子挙動(慣性による粒子分散状態や粒子回転運動)の変化を考慮したレ オロジー評価は明らかになっていない.本研究では、懸濁液流れ(固液混相流)解析を行い、 慣性移動(inertial migration)を伴う平行平板間の懸濁液流れにおいて、粒子の分散状態お よび個々の粒子の運動が、懸濁液の実効粘度に与える影響を明らかにすることを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

慣性を伴う流路内流れにおいて,懸濁粒子は流れと直交する方向に移動し,速度勾配に起 因する揚力と壁面からの反発力が釣り合う平衡位置に集約する.この現象を数値シミュレー ションによって再現し,圧力駆動される懸濁液流れ解析により,懸濁粒子の挙動(空間分散 状態,並進速度および回転角速度)と局所的な実効粘度分布との関係を明らかにする.

具体的には,(i)粒子濃度が平衡位置に与える影響,(ii)平衡位置に集約するまでの粒子分散状態の遷移と実効粘度の時間履歴,(iii)粒子の回転角速度や並進速度が実効粘度に与える影響を調べる.

研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 3.1 研究成果の意義

複雑流体のレオロジーを理解し、さらには制御するには、流体力学の巨視的な視点のみな らず、粒子の分散状態や分子構造といった微細構造との関連を知る必要がある.分子構造に 関しては高分子や化学反応などの専門家による研究がなされている一方で、メゾスケールの 粒子構造とレオロジー特性の関係は、経験則的な理解(実験結果に対する近似モデルなど) に留まり、物理的な理解に至っていないのが現状である.そのため、固体粒子と流体の相互 作用を考慮した two-way coupling による数値シミュレーションを行い、マイクロチャネル内 流れの実験的知見とも合わせて、多角的に複雑流動の理解を深める.本研究は、複雑流体の 流動特性を流体力学的観点から明らかにし、将来的に機能性流体の創製につながる基盤を築 くという点で意義がある.

2.2 プログラムのチューニングと新しい評価方法の模索

当初の予定では、(これまでワークステーションでは現実的な時間で計算できなかった)濃 厚系懸濁液に近づく濃度の懸濁液流れの解析を行い、(i)粒子濃度が平衡位置に与える影響、 (ii)平衡位置に集約するまでの粒子分散状態の遷移と実効粘度の時間履歴、(iii)粒子の回転 角速度や並進速度が実効粘度に与える影響を調べる計画であった.しかし、濃度を上昇させ ると計算が破綻し、この解決のためにプログラムのチューニングに手間取ったため、予定し ていた計算を達成できなかった.

一方で、粒子の運動や壁面からの位置を考慮した個々の粒子の実効粘度への寄与を、壁面 せん断応力分布として重ね合わせることにより、非一様分散の懸濁液流れの実効粘度を評価 する方法を模索した.今後はこの方法を用いて、より濃度の高い懸濁液流れの解析を行う.

3. 研究目標の達成状況

研究目標の「粒子の回転角速度や並進速度が実効粘度に与える影響」について,前述の新 しい懸濁液の実効粘度の評価方法の導入により,個々の粒子の運動による影響を評価できる 見通しを立てることができた.しかし,粒子濃度の影響を調査するためのパラメトリックス タディは実施することができなかった.

4. まとめと今後の課題

粒子の回転角速度や並進速度が実効粘度に与える影響を明らかにするため,壁面せん断応 カ分布を用いた局所的な相対粘度分布評価を導入することを検討した.今後は,粒子濃度, (流路幅に対する)粒子の大きさ,流動条件などのパラメータを変更し,流路内流れにおけ る慣性移動を伴う懸濁液流れの粒子挙動とレオロジーの関連を明らかにする.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

該当なし

著書

該当なし

国際学会

 M. Kawaguchi, T. Fukui and K. Funamoto: Numerical Viscosity Estimation Considering Inertial Migration in Plane Poiseuille Suspension Flow. Proceedings of the 22nd International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2022), (2022), pp. 148-149.

国内学会・研究会等

該当なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	CL01OCT22
研究種別	共同研究
利用期間	$2022.10 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月24日提出

数値シミュレーションによるアンモニア球状火炎伝播特性の解明

中村 寿

東北大学流体科学研究所 准教授

武藤 昌也

名城大学理工学部 准教授

橋本 望

北海道大学大学院工学研究科 准教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

通常重力下における球状火炎伝播実験はこれまでに国内外で多数実施されているが、微小 重力環境下においてアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播を対象とした研究例はこれま でにほとんど報告されていない.本研究では、三次元直接数値シミュレーションを実施でき る流体計算用コードを用いて、微小重力下および通常重力下でのアンモニアの球状火炎伝播 計算を実施し、これまで国内外で取得されてきた微小重力下および通常重力下でのアンモニ ア/空気予混合気の燃焼速度計測実験に対して、浮力の影響がどのようなメカニズムで作用し ているのかを明らかにすることを試みる.このことにより、これまで取得されてきた世界中 の実験データに補正を加える必要性を議論することができるようになり、今後のアンモニア を燃料として利用する様々な機器の設計に必要な燃焼速度に関して、精度の高いデータを提 供することが可能となると期待される.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究期間内では、数値シミュレーションによりアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播 特性を明らかにする.過去に北海道大学において実施された、微小重力環境下におけるアン モニア/空気予混合気の火炎伝播実験と地上の通常重力下で実施した火炎伝播実験を再現す るような数値シミュレーションを行い、両者の実験結果の違いを数値シミュレーション上で も再現することを試みる.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 新しい解析手法の開発

本研究では、数値シミュレーションによりアンモニアの球状火炎伝播特性を明らかにする

ため、東北大学流体科学研究所・中村寿准教授が構築したアンモニア詳細化学反応機構を、 三次元直接数値シミュレーションを実施できる流体計算コードに実装し、微小重力下および 通常重力下での火炎伝播計算を実施した.

2.2 解析手法の妥当性の検証

2.1節で開発した解析手法により,通常重力下においては,数値シミュレーションの結果は 実験計測値と概ね一致し,本シミュレーション手法によりアンモニア/空気予混合気の球状火 炎伝播が精度良く捉えられることが分かった.一方,微小重力下では数値シミュレーション の結果は実験計測値による火炎伝播速度を過小評価し,実験計測において見られた微小重力 下および通常重力下でのアンモニア/空気予混合気の燃焼速度の差異を再現することはでき なかった.

3. 研究目標の達成状況

本研究期間内において、数値シミュレーションによりアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝 播特性を明らかにすることを試みた.その結果、本数値シミュレーション手法の妥当性を確認 することはできたが、実験計測における微小重力下および通常重力下での火炎伝播速度の差異 を再現するまでには至らず、達成状況としてはやや不十分と考えられる.

4. まとめと今後の課題

本研究では、数値シミュレーションによりアンモニア/空気予混合気の球状火炎伝播特性を明 らかにすることを試みた.その結果、通常重力下においては、実験計測値と概ね一致するよう な数値シミュレーション結果を得たが、微小重力下では実験計測値による火炎伝播速度を過小 評価し、微小重力下および通常重力下での火炎伝播速度の差異を再現するまでには至らなかっ た.今後は、数値シミュレーションの手法のさらなる検討、精度向上が課題である.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

該当せず

著書

該当せず

国際学会

該当せず

国内学会・研究会等

該当せず

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

該当せず

I.研究成果概要

一般研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01APR21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 2 回報告

2023年7月20日提出

境界層遷移のモデル構築とそれに基づいた層流化デバイスの設計

廣田 真 東北大学流体科学研究所 准教授 城崎 孝之 東北大学大学院情報科学研究科 M2 安田 義浩

東北大学流体科学研究所 派遣職員

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

民間航空機の低燃費・低 CO2 化を目指して、摩擦抵抗の小さい層流翼の研究が盛んに行わ れており、翼周りの境界層流れをできる限り層流化する様々な試みが行われている。摩擦抵 抗は全体の抵抗の約 50%を担うといわれており、特に主翼が大きな割合を占める。民間機で 広く用いられている後退翼では、前縁近傍で生じる横流れ不安定性が乱流遷移を引き起こす ので、これを抑制することができれば、境界層の乱流遷移位置が下流側へ移動し、層流領域 を拡大できると期待される。このような層流化をもたらすデバイスとして、翼面にミクロな 突起物を周期的に配置して遷移を遅らす DRE(Discrete Roughness Elements)法がある。し かし、2019 年にテキサス A&M 大学のグループが飛行試験まで行ったが、再現性のある層流 化効果は確認できず、詳細な遷移プロセスの理解に基づいたデバイスの性能向上が課題とさ れている。実機の飛行環境において境界層内部の様子を観察することは不可能なため、CFD 解析によるデバイスの性能評価と予測が重要な役割をもつ。

本研究は DRE よりも層流化効果の高いデバイス(波形粗さ要素 SRE)をこれまでに提案して おり、その層流化効果を流体科学研究所の低乱風洞施設で実証する計画が NEDO プロジェク トの一環で現在進められている。本研究はそのためのデバイスの最適設計とロバスト性の評 価を行い、単に CFD 解析で予測するだけでなく、それが実験結果を再現できるような予測に なっているかを検証する。さらにはこうした CFD 解析を用いずとも最適なデバイスが提案で きるような理論モデルの構築を目指している。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では実際に風洞実験で計測された流れ場と圧力分布に合わせて適切な SRE デバイ

スを CFD で設計し、その実験結果をフィードバックしてさらなるデバイスの改善と最適化を 目指す。そして、風洞実験と CFD 解析の知見を踏まえて理論モデルを構築し、飛行環境にお いても高い層流化効果が期待できる最適なデバイスの指針を得ることを目標とする。

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 風洞試験における層流化効果の高い SRE デバイスの設計と数値的検証 2022 年 2 月に行った実験では SRE の層流化効果を確認することに成功した。ただし、これ は SRE 自身によって乱流が発生して逆効果となってしまうことを回避するため、高さや幅な どを控えめにした安全側の設計であった。また、実験ではスパン方向にも圧力勾配が存在し てしまったことが原因で、横流れ不安定性の成長が CFD の予測よりも小さいという問題もあ った。これらを踏まえて 2022 年 6 月の実験では圧力分布を改善した上で、さらに高さや幅 を大きくした SRE を追加で二つ設計してその効果を検証した。いずれも CFD で予測した通 りに乱れがさらに低減される傾向が見られ、確かに層流化効果の向上が得られることがわか った(図 1)。



図 1. 左:風洞試験と層流化デバイス(SRE)の様子、右:スパン方向にフーリエ分解した揺らぎの振幅(丸や四角印が測定結果)



図 2. 最適な角度(θ R)に沿って伸ばした SRE の形状

2.2 高い層流化効果をもつ SRE の提案とその物理機構

波形粗さ要素 SRE の幅を下流域まで伸ばしていけば、境界層に対する影響はさらに大きくなる。しかし、適切な角度に沿って伸ばさないと、横流れ渦列を安定に維持できず、むしろ渦

列を崩壊させて乱流を引き起こしてしまう。本研究では三次元境界層分布に応じてこの適切 な角度を計算する方法を提案し、それに沿って SRE を設計すれば、横流れ渦列が SRE の波 形構造と同期し、渦が崩壊しにくいことを発見した。これについては新たな特許として、日 本と米国に申請を行った。

2.3 実機の主翼における層流化効果の評価に向けたコード開発

これまでの CFD 解析や風洞試験は、いずれも平板上の境界層を対象として研究を行い、知見 を積み重ねてきた。精度の高い計算や計測が行いやすく、層流化のメカニズムについてはか なり明らかになったといえる。しかし、実際の主翼まわりに対する定量的な予測を CFD で行 うには、曲率をもった翼面まわりで実際の流速・圧力分布に合わせた流体解析をしなければ ならない。SRE は前縁に非常に近い所に配置するため、曲率の影響は大きく受けると思われ る。そこで、計算格子を一から見直し、様々な翼型と流速・圧力分布における境界層領域に 対して DNS 解析できるようにコードを改良した。

3. 研究目標の達成状況

境界層の速度分布、さらにはその線形安定性の情報まで明らかであれば、層流化効果をもつ適切な SRE デバイスを予想して設計できるようになった。風洞試験において SRE の層流化効果 を確認することができ、CFD で予測した通りの層流化効果向上もみられた。実際の主翼における壁面曲率と圧力分布を考慮した CFD 解析も可能となった。

4. まとめと今後の課題

現実にどのような気流乱れが存在するのかは、あらかじめ CFD で予期することはできないため、 実験によって検証できたことは重要であった。乱れが大きい場合に SRE 自体が乱流を引き起こ してしまわないか懸念されたが、風洞実験では高さや幅を大きくした SRE も乱流を引き起こさ なかった。これは SRE の設計と性能向上にまだ余裕があることを示している。飛行環境では風 洞環境よりも気流乱れが小さいので、今後のさらなる実用化に向けての展望が開けた。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

T. Shirosaki, M. Hirota and Y. Hattori: Optimization of turbulent transition delay effect using quasi-statically transforming wall roughness shape, Journal of Fluid Science and Technology, Vol.17, No.3, JFST0010, (2022)

M. Hirota, Y. Ide, Y. Hattori: Modeling of Crossflow-Induced Boundary Layer Transition, The Proceedings of the 2021 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology, Volume 1 (2023) pp. 395–408

著書 なし 国際学会 M. Hirota, Y. Ide and Y. Hattori: Numerical Study on Local Scale Similarity of Primary and Secondary Crossflow Instability, 18th International Conference on Flow Dynamics (2021.10) Online

T. Shirosaki, M. Hirota, Y. Hattori: Optimization of Turbulent Transition Delay Effect Using Dynamically Transforming Roughness Elements, 18th International Conference on Flow Dynamics (2021.10) Online

M. Hirota, Y. Ide and Y. Hattori: Modeling of Crossflow-Induced Boundary Layer Transition, 2021 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (2021.11) Ramada Plaza Jeju Hotel, South Korea

M. Hirota, Y. Ide and Y. Hattori: Laminarization of Three-Dimensional Boundary Layer by Artificially-Sustained Crossflow Vortices, 19th International Conference on Flow Dynamics, (2022.11) Sendai

M. Hirota, Y. Ide and Y. Hattori: Laminarizing effect of nonlinearly saturated crossflow vortices sustained by a sinusoidal roughness, 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (2022.11) Indianapolis

T. Shirosaki, M. Hirota, Y. Hattori: Efficient evaluation of the surface roughness effect on boundary layer using quasi-statically transforming roughness shape, 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (2022.11) Indianapolis

国内学会・研究会等

城崎 孝之,廣田 真,服部 裕司:動的変化する壁面粗さ形状を用いた乱流遷移抑制効果の最 適化,第35回数値流体力学シンポジウム (2021.12.15) オンライン開催

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 令和4年、特許出願2022-083772

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03APR21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 2 回報告

2023年7月19日提出

有機分子修飾界面におけるナノスケール界面現象の解明

菊川 豪太

東北大学流体科学研究所 准教授

熊谷 晴, 鈴木 創太

東北大学大学院工学研究科ファインメカニクス専攻 博士前期課程

犬飼 春太

東北大学工学部機械知能・航空工学科 学部4年

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

ナノテクノロジーやバイオ技術の進展に伴い,固体表面の表面処理技術が高度化している が,その中でも有機分子の自己組織化能を利用し、"ボトムアップ"的な手法で,原子・分子 オーダーの表面修飾を実現する自己組織化単分子膜(self-assembled monolayer, SAM)は, その広範かつ柔軟な特性から既に広く応用が進んでいる.このような有機分子を利用した表 面修飾技術は,次世代の半導体デバイスの冷却技術への適用が期待されるため,本研究では, 分子修飾膜界面における熱エネルギー輸送や濡れ特性に着目し研究を行う.特に,分子動力 学(MD)シミュレーションを用い,固体表面に SAM を修飾した界面での熱輸送特性や液滴 濡れを詳細に明らかにすることをねらいとしている.SAM 界面の界面熱抵抗を大幅に低減す る新規修飾膜の模索を目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では,種々の SAM 修飾界面の熱輸送解析を行い,界面熱抵抗の低減や界面親和性 の向上を実現する修飾技術を模索する.特に SAM 界面における界面熱輸送を支配する分子 論的メカニズムを明確にする.また,熱輸送特性や界面親和性に関して,分子動力学シミュ レーションによる新たな解析技術の構築を目指している.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 PEG 系 SAM/水界面における界面熱輸送特性

OH末端やCOOH末端官能基を有する polyethylene glycol (PEG)鎖とアルカン鎖からなる

SAM 分子を用いて SAM を構成し,水溶媒との界面熱コンダクタンスへの影響を明らかにした.その結果,OH 基末端より COOH 基末端を有する PEG 基 SAM では界面熱コンダクタン スが著しく大きいことを明らかにした.この分子スケール構造の要因を詳細に分析し,明確 にした.

2.2 SAM による固体間分子接合界面の熱輸送特性

金固体間をアルカンチオール SAM による直接接合した分子接合界面の計算系を構成し, MD シミュレーションを行った.分子接合の分子密度や基板固体間の圧力を変化させ,熱輸 送特性への影響を調べた.

3. 研究目標の達成状況

種々の SAM 種を用いた界面熱輸送解析および固体間分子接合界面の熱輸送特性に対する目 標について,概ね目標を達成した.

4. まとめと今後の課題

今後, SAM 界面での熱輸送特性について,溶媒や SAM の種類をさらに拡張して,実デバイ スで想定される界面モデルを用いた解析を実施したい.固体間を直接有機分子で接続する分子 接合系に関する熱輸送解析を進め,熱輸送メカニズムを明らかにする.また,物理的・化学的 不均一性を有する SAM 表面における液体の親和性を明らかにする.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

国内学会・研究会等

1. 熊谷 晴, 菊川 豪太, 第36回数値流体力学シンポジウム, (2022), E05-4.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04APR21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年7月10日提出

固気液接触線でのマルチスケール性を考慮した相変化熱流体解析

岡島 淳之介

東北大学流体科学研究所 准教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

気液二相流の数値シミュレーションはこれまでに数多くの研究のもと発展しており,汎用 の熱流体解析ソフトウェアにも標準的なモデルを利用できる状態にあるが,沸騰現象の数値 シミュレーションは十分に発展していない状態にある.特に固気液三相接触線近傍の取り扱 いは現在でも発展途上であり,熱輸送に大きな寄与がある固体壁面上での蒸発現象を適切に 表現できていないことが原因である.

そこで本研究では、沸騰・蒸発現象における固気液三相接触領域での微視的な濡れ現象及 び蒸発現象がマクロスケールの気液二相熱流動挙動に与える影響を明らかにし、沸騰伝熱の 素過程を十分に再現できるシミュレーションの実現を目的にする.

1.2 研究期間内の最終目標

沸騰・蒸発現象において、固体壁から流体にどのような経路で熱が輸送されるかというの は、現象理解および工業的に重要な熱輸送促進を達成するために必要な知見である.しかし ながら、蒸発が強く生じる接触線のスケールと、気泡・液滴の熱流体挙動のスケールは大き く乖離しているため、マルチスケールの解析が必要となる.本研究は、このマルチスケール 性を適切に表現し、核沸騰熱伝達、対流沸騰熱伝達、加熱面への液滴衝突などの相変化伝熱 を伴う混相流現象におけるマルチスケール性を評価する.

- 2. 研究成果の内容
 - 2.1 核沸騰熱伝達におけるミクロ液膜形成

水の核沸騰熱伝達において重要となるミクロ液膜の直接数値シミュレーションを行った. ミクロ液膜は加熱壁面上に付着した蒸気気泡が膨張・成長する過程で,加熱壁面上に形成される薄い液膜のことであり,高い熱輸送性能を有することが知られている.現象が高速かつ 小さなスケールで生じるため,これまでは実験・数値シミュレーションともに評価が難しい 現象であったが,近年,その直接数値シミュレーションがいくつか報告されるようになって きた.本研究では,直接数値シミュレーションで考慮されていなかった①気泡の離脱および ②固体壁面内の熱伝導の両面を取り入れた世界初のシミュレーションを実施した.既知の実 験データをベンチマークとして計算結果を比較し,壁面温度の時間変化を定量的に一致させ るためには、マイクロメートルオーダーの固体の多層構造を考慮する必要があることがわか った.また、同様の初期条件であっても、固体の熱伝導率が形成される液膜の厚さや乾くま での形状変化に大きな影響を及ぼすことを明らかにした.さらに流体の熱物性値を変更しミ クロ液膜の形成に関わる因子の検討を行った.特に粘性係数が増加するとミクロ液膜は安定 して形成するようになるが、厚みも増加するため、蒸発熱伝達量が低下することがわかった.

3. 研究目標の達成状況

沸騰伝熱の重要な課題であるミクロ液膜の形成の直接数値シミュレーションに取り組んだこ とは、本研究目標の中で重要な一歩である.ミクロ液膜形成における流体および固体の熱物性 値の影響を評価したことで、実験では得ることができない知見を獲得した.また、並行して蒸 発を伴う動的接触角のモデルの構築に取り込んでおり、十分な進捗があった.

4. まとめと今後の課題

核沸騰熱伝達におけるミクロ液膜の直接数値シミュレーションを行い,実験データとの比較 により,定量的な一致のためには固体壁の多層構造での熱伝導の再現が必要であることが示さ れた.また,流体の熱物性を変更することでミクロ液膜形成に及ぼす熱物性の影響も明らかに した.一方で,気泡の形状・運動については再現が不十分であり,蒸発を伴う動的接触角モデ ルの導入が今後の課題である.

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文・学会発表

国際学会

J. Okajima, P. Stephan: Analysis on Characteristics of Dynamic Contact Angle Derived from Evaporative Moving Contact Line Model, Surface Wettability Effects on Phase Change Phenomena (SWEP) Workshop 2021, (2021), No. 13.

国内学会・研究会等

岡島淳之介:蒸発を伴う動的接触線の熱流動解析による動的接触角の特性評価,第58回日本 伝熱シンポジウム講演論文集,(2021)A322.

大田光希,岡島淳之介:ミクロ液膜形成を考慮した核沸騰熱伝達の数値シミュレーション, 第 59 回日本伝熱シンポジウム,(2022) B131. プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年07月25日提出

化学気相堆積法および原子層堆積法における

成長機構の量子論的/分子動力学的解析

徳増 崇, 上根 直也 東北大学流体科学研究所 教授, 特任助教

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

化学気相堆積(Chemical Vapor Deposition: CVD)法および原子層堆積(Atomic Layer Deposition: ALD) 法はガス状原料の供給とその化学反応を制御して所望の薄膜を形成する 手法であり、半導体産業における基幹技術である.しかし、成膜に至るプロセスは物質移動、 熱移動および化学反応を含むため非常に複雑であり、新規膜種の開発は試行錯誤的に行われ るばかりで多大な経済的および人的資源を消費している.そのため我々は、化学反応と動力 学を考慮した高精度なシミュレーションを行い、開発プロセスを大幅に改善することを最終 目標としている. ここでは, Si 基板上に SiH_x種および GeH_x種(x=2 or 3) を導入し, SiGe 薄膜を成長させる PECVD 法に着目し、その成長機構を解明することを第一の目的とする. その後、これらの知見を活かしてより複雑な窒化ホウ素(Boron Nitride: BN) 材料の ALD 成膜機構の解明を第二の目的とする.手法に関して,化学反応を再現するためには第一原理 計算に基づいた量子化学的手法を用いることが一般的である.ただし、そのような手法では 多数の原子を取り扱うことは計算負荷の観点から現実的に難しく,最終的に数10 nm スケー ルの比較的大規模な形成膜の組成を解析することは困難である。そこで本研究では、反応性 力場(Reactive Force-Field: ReaxFF)を用いた分子動力学(Molecular Dynamics: MD) 法によって解析を行う. 比較的大規模な系において成長機構を分子動力学的に解析した研究 は国内外でも例が少ないため学術的にも非常に意義深く、加えて工学的にも応用先が広いこ とから大変価値のある研究である.

1.2 研究期間内の最終目標

CVD 法および ALD 法における微視的な表面反応機構の理解,また実際の成膜によって得られる薄膜の構造特性(結晶性等)・成膜特性(成膜速度等)と成膜パラメーター(基板温度等)の相関関係について理解することを本研究の最終目的とする.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 PECVD プロセスおよび ALD プロセスにおける成膜機構の解明

昨年度までに、Si 基板上に SiH_x 種および GeH_x種(x = 2 or 3)を供給することで SiGe 薄膜を成長させる PECVD プロセスシミュレーションを実施し、気体分子種が成長薄膜の組成や結晶性に及ぼす影響を解明した.

本年度は、これらのCVDプロセスで得られた知見を活かしてより複雑なBCl₃およびNH₃ からBNを成長させるALDプロセスの解析に取り組んだ.分子動力学シミュレーションを実 施するには、原子間の相互作用を適切に記述する力場が必要であるため、ReaxFFを開発した ペンシルベニア州立大学のProf. Adri van Duinのグループに滞在することで BCl₃および NH₃ からBNを成長させるALDプロセスを記述可能な力場を構築した.開発した力場を用いて、 ALDプロセスシミュレーションを行ったところ、BNは成膜初期においては3次元的なクラス ター成長と2次元的な成長が混合していることが示唆された.このような初期成膜機構は、 熱運動によって気体分子が表面拡散する現象を考慮することで初めて明らかとなった.

3. 研究目標の達成状況

各種気体分子(SiH₃, SiH₂, GeH₃, GeH₂)から構成される気体分子比率が,成長薄膜の組成や結 晶性に及ぼす影響を定量的に算出し,その成長機構について明らかにした.本研究内容は2023 年度初旬に,American Chemical Society (ACS) 社の Crystal Growth & Design にて発表される予 定である.また,BCl₃および NH₃を用いて BN 薄膜を成膜する ALD プロセスにおいて基板温 度が動力学と化学反応の両方を同時に含む表面反応機構および成膜機構に及ぼす影響を理解す るために ReaxFF MD シミュレーションを実施した内容についても,2023 年度中に ACS 社から 発表される予定である.したがって,研究目標は十分に達成されたと言える.

4. まとめと今後の課題

第一の目的である,Si 基板上にSiH_x種およびGeH_x種(x = 2 or 3)を導入し,SiGe 薄膜を成 長させる PECVD 法における成長機構を解明が達成された.第二の目的である,BCl₃およびNH₃ を用いてBN 薄膜を成膜するALD プロセスにおいて基板温度が表面反応機構および成膜機構に 及ぼす影響も明らかとなった.今後は、今回対象としたSiGeやBN以外の材料をも対象とした CVD および ALD プロセスを包括的に理解することを目指す.さらに、成膜プロセス以外のエ ッチングや酸化プロセスなど半導体プロセスにおける様々な学術的・産業的な課題に分子動力 学法シミュレーションによって挑む予定である. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, Y. Jin, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, Reactive Force Field Molecular Dynamics Study of the Effects of Gaseous Species on the Composition and Crystallinity of Silicon–Germanium Thin Films」, [Crystal Growth & Design], American Chemical Society, Vol.23, 4990-5000, (2023)
- N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, Y. Jin, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, Growth mechanism study of boron nitride atomic layer deposition by experiment and density functional theory j, Computational Materials Science J, Elsevier, Vol.217, 111919, (2023)
- N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Reactive force-field molecular dynamics simulation for the surface reaction of SiH_x (x =2-4) species on Si(100)-(2×1):H surfaces in chemical vapor deposition processes」, 『Computational Materials Science』, Elsevier, Vol.204, 111193, (2022)
- 4. N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Reactive Force-Field Molecular Dynamics Study of the Effect of Gaseous Species on Silicon-Germanium Alloy Growth by PECVD Techniques」, 『Proceedings of the 2021 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices』, IEEE, (2021)

著書

特になし

国際学会

- <u>N. Uene</u>, T. Mabuchi, Y. Jin, M. Zaitsu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Atomic-scale PECVD Process Simulations at Si / Silicon-Germanium Interface by Reactive Force-Field Molecular Dynamics J, 『The 33rd International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-33)』, WeP-31-13, Nagoya, Japan, November 2022
- (Invited) <u>T. Tokumasu</u>, N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, and S. Yasuhara 「Reactive Force-field Molecular Dynamics and DFT Simulations for the Thin Film Growth by CVD and ALD Techniques」, 『9th International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces (ISCSI-IX)』, Nagoya, Japan, September 2022
- <u>N. Uene</u>, T. Mabuchi, M. Zaitsu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, Reactive Force-Field Molecular Dynamics Study of the Effect of Gaseous Species on Silicon-Germanium Alloy Growth by PECVD Techniques], [2021 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and

Devices], Dallas, USA, September 2021

 <u>N. Uene</u>, T. Mabuchi, Y. Jin, M. Zaitsu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu, 「Density Functional Study on ALD Precursors for Hexagonal Boron Nitride Deposition」, 『21st International Conference on Atomic Layer Deposition』, Florida (all-virtual), USA, June 2021

国内学会・研究会等

- 1. 上根直也,馬渕拓哉,Jin Yong,財津優,安原重雄,**徳増崇**,「反応分子動力学法を用いた CVD/ALD 法における成膜表面反応現象の分子論的解析」,『第1回 ARIM 量子・電子マテ リアル領域セミナー ALD(原子層堆積)による成膜技術』,2022年12月
- 2. 小崎祐助,上根直也,馬渕拓哉,徳増崇,「プラズマ援用原子層堆積プロセスで生じる気相 粒子の反応散乱モデル構築に向けた反応性力場分子動力学シミュレーション」,『第13回 マイクロ・ナノ工学シンポジウム』,徳島,日本,2022年11月
- 3. 上根直也, 馬渕拓哉, Jin Yong, 財津優, 安原重雄, 徳増崇, 「CVD/ALD 薄膜成長における 材料/プロセスと構造/組成の最適化に向けた反応性力場分子動力学法および密度汎関数法 による数値シミュレーション研究」, 『応用物理学会分科会 229 回研究会』, オンライン, 日本, 2021 年 7 月(招待講演)
- 5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等) 特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年8月1日提出

炭化水素系アイオノマー内部の物質輸送特性の解明

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

紀 佳淵

東北大学流体科学研究所 特任研究員

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池(PEFC)の触媒層では、高分子を含むアイオノマー薄膜で白金触媒が覆 われている.アイオノマーが厚いほどプロトン伝導性は上昇するが、アイオノマーが薄いほ ど酸素透過性は上昇する.PEFC の発電効率向上のためには、これらの相反する特性を両立 する触媒層の設計が不可欠である.今回の研究では、スルホ酸化ポリフェニレン(SPP-BP)と いう高いプロトン導電性と化学的安定性を併せ持つ炭化水素系高分子膜に焦点を当てて、ア イオノマーの内部現象の解析を行い、白金表面の吸着現象や酸素輸送特性およびプロトン伝 導性の解明を行うことを目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、PEFC 触媒層において、SPP-BP 高分子を用いた炭化水素系アイオノマーの構 造特性を解明する。そして、ナノスケール構造に基づく酸素透過メカニズムとプロトン伝導 性を明らかにする.また、従来のパーフルオロスルホン酸高分子のアイオノマーの酸素透過 性・プロトン伝導性と比較することを行う.これにより、低コスト・高性能を持つ高分子構 造の設計に貢献できると考えられる。

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - **2.1**計算系の構築と開発

従来のフッ素系の電解質膜材料は Nafion (EW=1144)を使用する.新素材の SPP-BP のポリ マー構成については、モノマーのランダム性を考慮して、シーケンス(v型)とランダム(r型) の二つのタイプを考えた.白金のモデルは白金原子を面心立方格子構造として三層構造で作 成した.ポテンシャルについて、分子モデルの相互作用は DREIDING forcefield を使用した. 白金と水分子の相互作用は Spohr ポテンシャルを使用し,それ以外は DREIDING のデフォ ルト値である Lennard Jones ポテンシャルで表した.また、Spohr ポテンシャルには, lammps に含まれないため,プラグインの形で lammps のソースコードに追加した. Spohr モジュー ルを正しく動作することを確認した.

2.2 アイオノマーにおける白金表面の吸着現象の解明

分子動力学シミュレーションを行って、新たな SPP-BP (v型とr型)と従来の Nafion 材料を 用いたアイオノマーの構造特性と水の拡散特性を解析した.計算結果より、炭化水素系アイ オノマーにおいて、水と親水性のスルホ基の密度分布が一致し、白金表面に高分子が良く吸 着していることを示した. 膜表面-真空の界面には、高分子主鎖が表面に、水とスルホ基は 少し内部に分布し、Nafionの結果と同様であることが確認された.水のクラスターに関する 特徴は、v型のサイズが大きく、プロトン輸送性が高いと考えられる。水の拡散特性には、v 型とr型の SPP-BP アイオノマーについて同程度の値を示し、その値は Nafion と比較して、 低いことが示された.

2.3 酸素透過に関する計算系の構築とスクリプト開発

酸素透過に対するシミュレーションを行うために、過去に使用した三面周期境界条件での吸 着現象の計算で使われた力場ファイルを基に、酸素分子の構造モデルを作成し、酸素と他の 原子の相互作用力のパラメータによるポテンシャルのファイルを作成した。Pt-O(O₂)の作用 力を正しく再現するために、WCA というポテンシャルに基づくポテンシャル(Modified WCA)の開発を行った。

酸素分子のモデルを三層構成の白金構造が含まれる計算系に添加するために、fix deposit と いうコマンドを利用した。また、fix evaporate コマンドを導入し、酸素分子の削除を行った。 その他、nvt の制御方法や、酸素分子の初期速度と温度のコントロールに係る内容を検討し てきた。

2.4 Nafion アイオノマーに対する酸素透過シミュレーション

上記作成されたスクリプトを使用して、白金構造、酸素分子モデル、Nafion 高分子のモデル、 水分子モデルなどを用いて、含水率3の条件における計算系の構築を行い、計算を実行した。 膜厚が3.0~3.5 nm において、含水率が3、7、11、14で酸素エリアの圧力が100 MPaの条 件で計算を行った。結果の分析には、酸素透過時間に対して、酸素の密度分布(z方向)を解 析した。酸素透過の解析のため、定常状態における時間にあたる酸素分子の透過個数を調べ た。これらの結果を用いて、酸素透過の解析を行った。

2.5 SPP-BPを用いたアイオノマーの酸素透過の計算

SPP-BP アイオノマーを用いた酸素透過の計算について、Nafion に対する計算ファイルを基 づいて、計算スクリプトを作成した。 膜厚 3.3 nm 程度の SPP-BP アイオノマーを、含水率 条件が 3、5、7 に設定し、分子動力学シミュレーションを行った。酸素エリアの圧力条件が 前の計算と同じ、100 MPa であった。その後、酸素透過の解析コードを使用して、定常状態 の結果において、単位時間における酸素分子の透過個数を解析した。解析の平均値を求める ため、それぞれの含水率条件でのシミュレーションと解析は複数回の計算を回した。また、 解析で得られた結果により、酸素の透過率を計算した。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、高いプロトン導電性と化学的安定性を併せ持つ新たな SPP-BP 高分子を用いた炭 化水素系アイオノマーの分子動力学シミュレーションを行った.まず計算系を構築し,この計 算系を使用して、白金表面における炭化水素系アイオノマーの構造特性と水の拡散特性の解析 に関しては目標を達成した.また、酸素透過に関するシミュレーションを実現するため、計算 系の構築とスクリプトの開発を行った.これにより、Nafion と SPP-BP 材料のアイオノマーに おける酸素透過のシミュレーションと解析に関する目標を達成した.

4. まとめと今後の課題

白金表面における高分子アイオノマーに対するシミュレーションの結果について、炭化水素系 アイオノマーの構造特性と水の拡散特性を明らかにした.さらに、従来の Nafion 材料との比較 を行った.炭化水素系高分子の構造による薄膜構造及び酸素透過性への影響についての解析を 行ったところ、SPP-BP という炭化水素系高分子構造のアイオノマーでは、従来の Nafion アイ オノマーより酸素透過率が高いことが分かった.今後の課題として、プロトン伝導性に関する メカニズムを解明することを行う予定である.

- 5. 研究成果リスト
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む) なし

著書

なし

国際学会

Jiayuan Ji, Sheng-Feng Huang, Takuya Mabuchi, Takashi Tokumasu, Study of Aromatic Hydrocarbon Ionomer Adsorption in the Catalyst Layer of a Polymer Electrolyte Fuel Cell Using Molecular Dynamics, The 9th International Fuel Cell Workshop 2022 (IFCW2022)– PEFCs: From Basic Science to Applications, 2022.11.15-11.16, Kohu, Japan.

Jiayuan Ji, Sheng-Feng Huang, Takuya Mabuchi, Takashi Tokumasu, Molecular Dynamics Study of Adsorption Phenomenon of Aromatic Hydrocarbon Ionomer in Catalytic Layer of Polymer Electrolyte Fuel Cell, 242nd ECS Meeting, 2022.10.9-10.13, Atlanta, USA.

国内学会・研究会等

紀佳淵, 黄聖峰, 馬渕拓哉, 徳増崇, 「固体高分子形燃料電池触媒層における芳香族高分子膜のアイオノマーの吸着現象に関する分子動力学解析」, 第35回数値流体力学シンポジウム,

B06-2, 2021.12.14-12.16.

紀佳淵, 黄聖峰, 馬渕拓哉, 徳増崇, 「分子動力学法による白金表面における芳香族高分子電 解質膜アイオノマーの吸着状態の解析」, 第 35 回分子シミュレーション討論会, 112P, 2021.11.29-12.1.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01SEP21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.09 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年7月27日提出

先端車輌基盤技術研究におけるスーパーコンピューティング

石本 淳

東北大学流体科学研究所 教授

鈴木 祥弘,多田 卓哉,佐々木 秀,平井 直人

日立 Astemo 株式会社

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

次世代超小型高エネルギー密度型 INV に適用する技術として,電動化における要素技術の構築が求められる.要素技術の物理モデルの構築と熱制御を踏まえ,高効率・小型化・高信頼性獲得に貢献する技術及び生産性の飛躍的向上に向けた技術の確立を目的とする.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、以下2テーマを推進する

- 次世代 PCU 向け新冷却システム構築と要素技術研究
 潜熱を活用した新冷却システムと最適化技術を用いて高性能/小型/低コストを実現する.
- ② レーザー溶融接合技術の数値解明 理論に基づく解析モデルを構築し、レーザー溶接で生じる実事象を再現することで製品設計 技術の構築につなげる
- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください) <研究の意義>

製品設計およびモノづくりにおける製造条件の設定には高度な調整は不可欠である.しかし, 求められる機能やモノづくりで生じる現象はいまだ解明されていないものが多く,従来の経 験に基づく設計手法では機能や製造条件を決定する因子の調整に時間がかかり,また十分な 検証ができなくなることが予測されている.そのため,自動車部品の高効率,小型,高信頼性を 獲得するうえで,物理現象の把握およびデータサイエンスに基づく事象の再現を行うことは産 業上および学術的な進歩に貢献する.

- 2.1 新しい解析手法の開発
 - ・ベイズ最適化によるヒートシンクのフィン形状の最適化
 - ・数値解析によりレーザー溶接過程を再現とメカニズムの解明
- 2.2 新しい現象の解明
 - ・ヒートシンク形状をベイズ最適化を用いることで,冷却効率と圧力損失の背反性を両立する フィン仕様の導出(下記計算結果の図を参照)
 - ・キーホール内のレーザー特性を考慮したレーザー溶接解析モデルの構築
- 3. 研究目標の達成状況
 - ベイズ最適化を用いて探索範囲の操作することで冷却器フィンの最適形状の探索が出来た。
 - ② OpenFOAM によるレーザー溶接数値解析ベースモデルの解析
- 4. まとめと今後の課題
 - ベイズ最適化による冷却器フィン仕様の最適化完了
 潜熱を利用したループヒートパイプの冷却システム最適化を行う予定
 - ② レーザー溶接の実事象と数値解析結果の理実証明および解析モデルの精度向上
- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - (1) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)
 [1] 大類有馬,石本淳,大島逸平,仲野是克,レーザー溶融プロセスに関する先端混相流 シミュレーション,第36 階数値流体力学シンポジウム,2022年12月14日(On-line).
 - 5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等)

予定なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01OCT21
研究種別	一般研究
利用期間	$2021.10.1 \sim 2023.3.31$
報告回数	第 2 回報告

2023年7月25日提出

粗視化分子動力学法における触媒層構造生成プロセスの解析

徳増 崇, 郭玉 婷

東北大学流体科学研究所 教授,特任助教

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池 (PEFC) の触媒層では,高分子を含む厚さ数 nm のアイオノマー薄 膜で白金触媒が覆われている.アイオノマー白金表面へプロトンを輸送するため,アイオノ マーが厚いほどプロトン伝導性は上昇する.一方で,酸素はアイオノマーを透過して白金表 面に到達するため,アイオノマーが薄いほど酸素透過性は上昇する.従って,PEFC の発電 効率向上のためには,これらの相反する特性を両立する触媒層の設計が不可欠であり,特に 高電流密度条件では,酸素供給不足が問題となっている.この触媒層のミクロ構造(空隙率, 屈曲度など)が触媒層のプロトン伝導性,酸素透過性の性能を決定する.触媒層の最終構造 は,この触媒インクの組成のみならず,触媒層の作成条件(塗工方法や乾燥時間,温度など) によっても大きく左右される.そのため,最終的に決定される触媒層構造と触媒インクの組 成や乾燥条件との関係性を理解し,触媒層構造形成現象を解明することが本研究の目的であ る.

1.2 研究期間内の最終目標

(1) 本研究では、まず PEFC 触媒層のアイオノマーが Pt 粒子で覆われているカーボン担体への薄膜形成現象について、溶媒種類や混合比によってアイオノマー凝集構造、Pt 粒子のサイズや分布、ナノ細孔のサイズに基づくアイオノマーの吸着過程に関するメカニズムを明らかにする点で研究期間の最終目標である.

(2) PEFC 触媒層の形成過程に関しては、蒸発モデルを実験結果に適用した解析が主で、ナノ スケール構造と蒸発特性とを関連づけた解析は乏しい.本研究では蒸発過程を表現するパラ メーターの最終的な吸着構造に与える影響を解析した.蒸発・拡散・沈降のバランスを表現 する無次元数であるペクレ数を考慮しアイオノマーのナノスケールの構造的要因について解 明する点で研究期間の最終目標である.

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - 2.1 触媒層における蒸発・拡散・沈降を再現する手法の開発 白金触媒並びにその表面のアイオノマー構造と蒸発・拡散・沈降を再現するために、触媒イ ンクの構造を決定するパラメーターを決定するために、蒸発、沈降、拡散を制御する無次元 数であるペクレ数と沈降ペクレ数を用いて、分子動力学によって解析できる時間スケールを 超えるシミュレーション手法を提案することで、実験的な蒸発条件と結びつけるようになった。
 - 2.2 薄膜形成現象の解明

触媒インクの組成,蒸発速度,白金触媒の分布は,蒸発中のアイオノマーの動的性質,また 最終的な薄膜構造に与える影響を調べた.触媒インクの構造を決定するパラメーターを決定 するために,希釈したアルコール/水混合溶液中のアイオノマーと白金粒子が覆われているカ ーボン担体へアイオノマー薄膜形成現象を解明した.

3. 研究目標の達成状況

触媒インクを水溶液として,蒸発速度が速い場合と遅い場合,白金触媒の分布が異なる場合の 分子系を構築し,平衡計算と非平衡の蒸発計算を行った.蒸発中のアイオノマーの動的性質, また最終的な薄膜構造に与える影響を調べた.それに関する論文を投稿中である.

4. まとめと今後の課題

触媒インクの組成,蒸発速度,白金触媒の分布は,蒸発中のアイオノマーの動的性質,また最 終的な薄膜構造に与える影響を調べた.将来的には,分散剤としてのアルコールの添加量を変 化させ,溶液組成が蒸発中のアイオノマー膜の動的特性と最終的な膜構造に及ぼす影響を調査 する予定である.また,多孔質カーボン基板モデルを作成し,ナノ細孔へのアイオノマーの沈 降現象を調査する予定である.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

郭玉婷,馬渕拓哉,李高阳,徳増崇:燃料電池触媒層の乾燥過程にアイオノマーの吸着と形態変化に関する分子論的解析,伝熱シンポジウム,2023.

5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題悉号	GR01NOV21
和必須可	
	一版 小九
利用期間	$2021.11 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年02月28日提出

ナフィオン膜における機械的特性と影響要因の解明

徳増 崇 東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

固体高分子形燃料電池 (PEFC) は、化学反応による化学エネルギーを直接電気エネルギーに 変換する装置である。なかでもプロトン交換膜は酸化剤と還元剤を仕切り、プロトンの通過 を可能にするため、プロトン輸送において重要な役割を果たす。プロトン交換膜は PEFC の 重要部分であり、通常は高温、高圧、高ストレス動作条件などの比較的過酷な環境で動作す る。したがって、プロトン交換膜の構造特性および機械的特性は PEFC の安定性と安全性の ために非常に重要である。本研究の目的は、ナノスケール解析に適用できる分子動力学シミ ュレーション法に基づき、PEFC で広く使用されているナフィオン膜の高分子特性と変形メ カニズムを解明することである。

1.2 研究期間内の最終目標

本研究はナフィオンの構造特性と機械的特性に重点を置いている。含水率が異なるナフィオンに圧縮応力と引張応力を印加し、負荷過程と除荷過程を完了すると、例えば圧縮で始まるサイクルには圧縮負荷、圧縮除荷、引張負荷、引張除荷の4段階が含まれる。機械的特性の変化を解析し、ナフィオン高分子の変形過程、特に変形過程のメカニズムに影響を及ぼす要因を特定した。

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - 2.1 一軸引張機械的特性

ナフィオン膜材料は、PEFC の組立て中および実動作中の圧縮や引張などの外力による変形 を受けることになる。変形は内部構造の変化を引き起こし、ナフィオン膜の性能に影響する ことがある。ナフィオン膜の一軸延伸に関する分子動力学(MD)シミュレーションにより、 ナフィオンの内部構造の変化と機械的特性の変化の関係を解析した。結果によると、ひずみ が大きくなるとヤング率は低下する。つまり、ひずみは大きくなるとこの材料の弾性域から 外れ、塑性変形を生じさせる。圧縮応力条件にある材料のひずみが大きいと、水を輸送する 機能が低下する。これはひずみが小さい場合にも当てはまることがある。それと正反対のこ とが引張応力条件にある材料について言える。

2.2 高分子の絡み合いの度合いの影響

高分子の絡み合いの度合いが変化すると、通常は高分子の特性も変化する。例えば、絡み合いの度合いが大きい高分子の強度は上昇する場合がある。原子の熱運動は高温にすると増進し、それにより系の絡み合いの度合いが上昇する。この方法は現在のところ、含水率が低い系では絡み合いの度合いを約50%上昇させることができる。含水率が高い系では、体積依存性とエネルギー依存性のために計算がうまくいかない。低含水率系に関する最終結果によると、絡み合いの度合いが増しても、現行の系では動径分布関数(RDF)、水質量、水拡散特性などのパラメータは大きく変化しない。現行の絡み合いの度合いの上昇は材料の特性に大きく影響しない。

2.3 高分子の一軸引張・圧縮・負荷・除荷循環過程が材料特性に与える影響

分子動力学シミュレーションの結果によると、負荷と除荷(引張と圧縮の順序に関係なく、 圧縮応力の負荷と除荷、あるいは引張応力の負荷と除荷)の循環過程において、負荷過程で の応力は常に除荷過程での応力よりも高い。つまり、ひずみが同じ場合、負荷過程での材料 応力は除荷過程での材料応力よりも高い。シミュレーション系には、高分子、ヒドロニウム イオン、水分子の3つの要素がある。材料応力の低下は、主に高分子の全体的な応力の低下 によるものである。エネルギーの観点から考えると、高分子全体のエネルギーは低下し、系 の総エネルギーは低下することになる。エネルギー損失は系の応力低下の原因となる。

2.4 含水率がヤング率に与える影響の解析

分子動力学シミュレーションの結果は、含水率の増加がヤング率の低下を引き起こすことを 示している。含水率が増加すると、高分子の側鎖同士の平均距離が増加する。この距離の増 加に伴い、分子間の相互作用は減少する。この現象により材料の耐変形性が低下するため、 材料の強度を反映するヤング率が低下する重要な理由となる可能性がある。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、ナフィオン膜に印加した外力による材料の構造の微視的変化、および含水率の違いがナフィオン膜に与える影響について解析した。結果によると、含水率が増加するとヤング率は低下する。計算値も、引張と圧縮において同じヤング率の傾向を示している。しかし、引張計算と圧縮計算で得たヤング率は異なる。含水率の増加に伴い、高分子の側鎖同士の距離が増加することが理由の一つとして考えられる。もう一つの理由として、高分子の絡み合いによる影響が考えられる。この点について、現行の絡み合いの度合いの上昇に限界があるため、メカニズムは解明も説明もされていない。エネルギーの観点から材料のヒステリシス現象を解析した。負荷過程のエネルギーと比べて、除荷過程のエネルギーは損失が多く低下する。エネルギー損失は材料応力の低下の原因となる。

4. まとめと今後の課題

高分子の変形過程に影響を及ぼす要因について解析し、ナフィオン高分子材料の変形メカニズ ムを解明した。メカニズムの一部は解明されているが、高分子の絡み合いに関連するメカニズ ムについては十分に説明されていない。今後の研究内容として、絡み合いが高分子に与える影 響をさらに解析するために使用する、絡み合いの度合いが大きいモデルを構築する新たな方法 を試みる。また、高分子のヒステリシス現象を解析し、この現象についての説明の全体像を明 確に示す新たな解析方法も試みる。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

なし.

著書

なし

国際学会

Haoran Wang, Takuya Mabuchi, Jiayuan Ji, Sheng-Feng Huang, and Takashi Tokumasu: Molecular Dynamics Study on the Microscopic Mechanism of Mechanical Properties of Nafion Membrane, Meet. Abstr. MA2022-02 1531.

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月24日提出

デュアルキャビティ保炎器を有するスクラムジェット模擬燃焼器に おける保炎性能の解明

小林 秀昭, 早川 晃弘 東北大学流体科学研究所 教授, 准教授 樋口靖浩, 乗松 慧生, 西浦 聡志 東北大学大学院工学研究科

1. 研究の目的と目標

1.1 研究の背景と目的

次世代の宇宙輸送機・航空機には超音速飛行および極超音速飛行での運用が要求されている. スクラムジェットエンジンは、このような極超音速飛行する機体への適用が期待されているエ ンジンであり、他の推進システムに対して軽量かつ高い比推力性能であるという特長がある. 一方で、エンジン内が超音速流れであり、燃焼の継続(保炎)や燃料と気流の混合が課題であ る.また、Ma(マッハ数) <5のような、比較的に低いマッハ数の飛行条件では燃料が自着 火せず、保炎はさらに厳しいものになる.そのため、低飛行条件では、燃料を強制的に着火さ せる手法が必要となる.しかし、エンジンの作動範囲を低速度側へと拡大し、運転可能条件を 広範囲とするには、低飛行マッハ数条件に着目して、燃焼現象や保炎性能を解明する必要があ る.

そこで本研究では、スクラムジェットエンジン模擬燃焼器に対して、キャビティ保炎器を2 つ設置したデュアルキャビティ保炎器を適用し、保炎性能を流れ場、燃焼場の観点から実験・ 数値計算により調査する.なお、デュアルキャビティ保炎器を有する燃焼器については、強制 着火手法の一つである予燃焼ガス噴射方式と組み合わせた燃焼器の研究例はない.したがって、 本研究の目的はデュアルキャビティ保炎器と予燃焼ガス噴射方式を有するスクラムジェット 模擬燃焼器について、保炎性能へ与える影響を流れ場や基礎燃焼特性の観点から明らかにする ことである.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、デュアルキャビティ保炎器と予燃焼ガス噴射を有するスクラムジェット模擬燃焼 器における保炎性能を、基礎燃焼特性と流れ場の観点で解明することが目的である.したがって、 最終目標は、デュアルキャビティ保炎器と予燃焼ガス噴射により、燃焼器内の流れ場や燃料の分 布,温度分布がどのように変化し、それによって保炎性能へどのような影響があるのかを明らか にすることである.

2. 研究成果の内容

スクラムジェット模擬燃焼器において気流境界層抽気を行った際の燃焼特性に関して数値解析 を行うため、Ansys 社の熱流体解析ソフトウェアである Fluent を使用し、三次元数値計算を行っ た.基礎方程式は、レイノルズ平均ナビエストークス方程式、全エネルギー保存の式、質量保存 の式および化学種の輸送方程式とした.また、レイノルズ応力を予測するための乱流モデルには Menter の SST k-ω モデルを用いた.燃焼計算においては、Muller らの H₂/O₂詳細反応機構であ る 9 化学種 19 素反応機構を利用した.予燃焼ガス組成の算出には、Chemkin-Pro による平衡計 算を用いた.また、反応計算時のソルバーには CHEMKIN-CFD ソルバーを使用した.

この数値計算により,実験では取得できない図 1(a)に示すような温度分布や,(b)に示す流線の 可視化が可能となった.なお,(a),(b)ともにデュアルキャビティとシングルキャビティの結果を 比較している.また,両図ともにデュアルキャビティは下流側のキャビティ位置で可視化,シン グルキャビティはこれと同じ位置で可視化している.これらによって,デュアルキャビティにお いて保炎可能な運転条件が拡大する要因を特定することができた.



(a) 下流側のキャビティ内の温度分布

(b) 滞在時間の可視化結果

図 1. 三次元数値計算結果

本プロジェクトによって新たに得られた知見は次の通りである.

- (1) デュアルキャビティにおいて、下流側のキャビティ内に再循環領域が形成される.
- (2) 再循環領域により,滞在時間の増加と高温領域,すなわち,可燃混合領域が形成され,下流 キャビティで着火可能になり,保炎範囲が拡大した.
- (3) 実験において観測された火炎の上流への移動は、燃焼器中央部に亜音速領域が形成されることによって生じた.
- (4) デュアルキャビティは、低飛行マッハ数条件においてスクラムジェットエンジンの保炎性能

を向上させる.

3. 研究目標の達成状況

本年度の研究活動によって、デュアルキャビティがなぜ保炎範囲を拡大するのかということに 対して、いくつかの要因を実験・数値計算により明らかにした.したがって、デュアルキャビテ ィによる流れ場と保炎性能に与える影響を解明するという、本プロジェクトの最終目標に対して 70%程度は達成することができた.

4. まとめと今後の課題

今年度の研究活動により,再循環領域による滞在時間の増加および高温領域の形成といった, デュアルキャビティが保炎範囲を拡大する要因を明らかにした.次年度においては,今年度検討 した要因に対して,これを追究するために様々な試験・数値計算を実施し,現象解明に取り組む.

また,実験により着火過程という非定常な挙動が保炎性能と密接に関係していることが示唆された.そこで,次年度では要因の詳細な検討に加えて,非定常現象を数値計算で再現できるよう, RANSからLESへと計算手法を発展させる.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

1. 乗松慧生,脇田陽平,工藤琢,早川晃弘,小林秀昭,超音速流における気流境界層吸込み が流れ場および保炎性能へ与える影響,日本航空宇宙学会論文集(採択済み)

著書

なし.

国際学会

ポスター発表

- K. Norimatsu, S. Nishiura, Y. Wakita, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, ffects of Boundary Layer Bleeding and Dual-cavity Flameholder on Flame Stabilizing in Supersonic Flows, 39th International Symposium on Combustion, 2022/07/26.
- K. Norimatsu, S. Nishiura, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Effects of Dual-cavity Flameholder on Flow Field and Flame Structure in Supersonic Flows, 19th International Conference on Flow Dynamics, 2022/11/09.

国内学会・研究会等

 1. 乗松慧生,西浦聡志,工藤琢,早川晃弘,小林秀昭,デュアルキャビティ保炎器を有する スクラムジェット模擬燃焼器における流れ場および火炎安定化に関する研究,日本航空宇 宙学会北部支部2023年講演会ならびに第3回再使用型宇宙輸送系シンポジウム,2023 年3月(発表申込み済み). 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし.

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR02APR22
研究種別	共同研究
利用期間	$2021.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年3月6日提出

ガスタービンおよび工業炉用バーナに対応した気液アンモニア 噴流燃焼に関する研究

小林 秀昭

東北大学 流体科学研究所 教授

Somarathne, K.D. Kunkuma A.

東北大学 流体科学研究所 特任研究員

Colson, Sophie

東北大学 流体科学研究所 特任助教

- 1. 研究の目的と目標
- 1.1 研究の背景と目的

近年のガス状アンモニア(GNH3)/空気燃焼の研究により、2050年のカーボンニュート ラル社会に向けて NH3 が有望なエネルギー源となることが分かってきた。当研究室では、 2014 年から 2019 年の SIP プロジェクトにおいて、GNH3/空気燃焼と GNH3/CH4/空気燃焼 を広範囲に研究した。その結果、GNH3/空気燃焼のリッチ・リーン2段燃焼技術により、未 燃 NH3 の排出をゼロに抑えながら、排ガス中の NOx 排出を O2 濃度 16%で 100 ppm 以下 に低減することができた。しかし、NH3 は常温で高圧ボンベ(0.9 MPa)の液体として供給 されるため, 気化させて燃焼させる GNH3/空気燃焼はガスタービン設備に新たなコストを生 じさせることになる。すなわち、液体アンモニア(LNH3)の気化と燃料ガスの再圧縮のた めのエネルギーコストとそれに伴う設備コストが付加される。エネルギーコストは、NH3の 低位発熱量のうち、蒸発潜熱が7~8%近くを占めることに起因する。これらの弱点を克服す るための解決策として、液体アンモニア(LNH3)を噴霧にして直接燃焼させる方法が考え られる。2019年から 2021年にかけて、当研究室は産総研 FREA とともに、メタン(CH4) と混焼するガスタービン燃焼器に LNH3 噴霧により、0.25MPa の圧力で2 段燃焼器を用い て LNH3 と CH4 の混合比(発熱量ベース)を 50~100%に変化させることに成功している。 その研究では、火炎安定化のため、予熱(500 K以上)された旋回空気流を用いた.また、 数値的研究では、H2/空気混合気と混焼する LNH3 噴霧燃焼の数値解析を行い、LNH3 熱量 比 49%で安定した低 NOx 燃焼を確認した。これは、LNH3 フラッシュ噴霧燃焼に関する世 界初の数値解析研究である。さらに、2021年4月から2022年3月にかけて、LNH3の発熱 量比を 50%から 100%に増加させ、LNH3 フラッシュ噴霧に関する研究を拡張した。そして、 GNH3/空気燃焼のような低エミッション燃焼を実現し、ガスタービン燃焼のみならず、新し いアンモニア燃焼技術の工業炉への適用を目指した。2022 年 4 月から 2023 年 3 月にかけて は、LNH3 フラッシュ噴霧過程の基礎研究に取り組んだ。 LNH3 フラッシュ噴霧過程はま だ十分に理解されておらず、今後の燃焼技術開発に向けて基礎的な研究が必要である。

1.2 研究期間内の最終目標

フラッシュ沸騰は、周囲圧力が液体の飽和圧力より低い環境に液体が放出されたときに起 こる現象である。本計算では、ラグランジュ粒子追跡法を用いてフラッシュ沸騰する LNH3 噴霧形成のモデル化を研究した。ノズル内部の核生成に基づく微粒化モデルをノズル出口で の境界条件として実装し、出現する噴霧液滴の過熱蒸発モデルを並列に作成した。また、初 期噴霧の円錐角度を仮定し、フラッシュ噴霧におけるノズル近傍の高密度噴霧領域の特性を 明らかにすることとした。

2. 研究成果の内容

2.1 新しい解析手法の開発

高圧のLNH₃がノズルから飽和圧力以下の低圧環境に噴射されると激しいフラッシュ沸騰 によりフラッシュ噴霧となり二相流が発生する。LNH₃のフラッシュ噴霧に関する数値解析 では、気相(連続相)、液相(離散相)、および二相間の相互作用を考慮する必要がある。気 相ではオイラー的なアプローチを採用し、液相ではラグランジュ的なアプローチを採用した。 噴霧中の液滴は分裂、抗力生成、フラッシュ沸騰、蒸発、熱伝達など多くの物理現象を生じ る。これらの相互作用については、ラグランジアンアプローチを用いたサブモデルで計算さ れた生成項をオイラーアプローチの気相方程式に導入するという、双方向の結合を数値研究 に導入した。気相では連続方程式、運動量および化学種の保存に基づく圧縮性 Navier-Stokes 方程式を空間的にフィルタリングして用いた。高圧のLNH₃が低圧環境に噴射され急激に加 熱されるため、本研究では平衡蒸発モデルとは別に非平衡フラッシュ沸騰モデルを採用した。 数値シミュレーションは、OpenFOAM-7 オープンソースコードのスプレーフォームソルバ ーを用いて実施した。本研究では3次元の計算領域でLarge Eddy Simulation (LES)を実 施した。

2.2 新しい現象の解明

0.1 MPa と 0.3 MPa の圧力下における LNH3 フラッシュ噴霧の軸方向および半径方 向の温度分布について、数値計算によって得られた実験結果と比較した(添付図参照)。数値 解析では、気相と液滴の相を分けて示している。蒸発領域では、平衡に達する前に気相の温 度は液滴の温度よりも高くなる。中心線に沿って、0.1 MPa の圧力下で、数値的に得られた 液滴相の温度分布と実験値はよく一致している。中心線上の液滴の数密度は高い。気相温度 分布では、すべての解析結果において、軸方向の最初の5 mm で指数関数的な温度低下が見 られた。この急激な温度低下は、強い沸騰と蒸発が発生するフラッシュ沸騰現象によるもの である。下流側5 mm でも温度は継続的に低下しているが、その速度は遅く、実験と数値解 析の両方で示されたように、0.1 MPa の場合、約 215 K (-60℃)の最小値に到達した。 このように下流側で気相の温度低下が遅いのは、すでに低温である周囲の気相から気化した液滴への対流熱伝達が遅いためであると考えられる。気化潜熱が対流熱伝達と釣り合ったときに最低温度に達する。しかし、LNH3の蒸気温度の最低値(-60℃)は、0.1 MPa での飽和温度(-33℃)を大きく下回っている。一般に、高圧下(0.3 MPa)での温度分布は、大気圧(0.1 MPa)の場合と同様の傾向を示し、最初の5 mmはフラッシュ沸騰により急激に温度低下し、その後はLNH3液滴の蒸発速度が遅いため、緩やかに温度が低下し続け最小値に到達することが分かる。さらに興味深いことに、0.3 MPa での最低温度は約-45℃であり、常圧の0.1 MPa での最低温度より高いことがわかった。

本数値解析により得られた軸方向位置(z) 30, 50, 100 mm における半径方向の温度分布 (気相および液滴相として)は、0.1 MPa における実験値と良い一致を示している。中心領 域は周辺領域よりも液滴数密度が高いため、中心領域では液滴相の数値解析による温度分布 と実験による温度分布はよく一致し、0.1 MPa ではほぼ同じ 210~215K(-60℃)程度であ った。その周辺領域でも、実験による値が気相数値解析による値に近づいている。軸方向の 位置では、気相数値解析と実験の両方が U 字型の半径方向温度分布を持っている。軸方向温 度分布と同様に、高圧力下では半径方向温度分布について実験による温度分布よりやや高い 値を示している。

3. 研究目標の達成状況

本研究では、ノズルから噴射された後の初期液滴サイズ分布を実験結果に基づいて仮定し、 0.1 MPa における LNH3 噴霧の半径方向および軸方向の温度分布を高精度で検証した。噴射 ノズルから放出された直後の噴霧は、二次微粒化とフラッシュ沸騰を生じている。このよう に、二次微粒化とフラッシュ沸騰に使用した数値モデルは、LNH3 フラッシュ噴霧形成の数 値解析に非常に適していることが確認された。

4. まとめと今後の課題

フラッシュ沸騰に関する最近の実験的研究では、初期の液滴サイズ分布が過熱度に大きく 依存することが明らかにされている。そのため、初期液滴サイズ分布には周囲圧の影響もあ るはずである。したがって、ラグランジュ粒子追跡数値解析法の境界条件として使用するた めに、パラメトリックな研究により初期液滴サイズ分布を決定することに研究を拡張するこ とが不可欠と考えられる。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

[1] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Emission characteristics of liquid ammonia/air flashing flames in a gas turbine-like combustor, Fuel (2023) (投稿予定).

著書
国際学会

K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, E.C. Okafor, A. Hayakawa, T. Kudo,
H. Kobayashi, Liquid Ammonia Spray Combustion and Emission Characteristics with
Gaseous Hydrogen/air Co-firing, The 13th Asia-Pacific Conference on Combustion (2021).

[2] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Towards the development of liquid ammonia/air spray combustion in a Gas turbine-like combustor, the 14th Asia-Pacific Conference on Combustion (2023) (Accepted).

[3] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Liquid Ammonia Spray Characteristics using a hollow cone nozzle at various ambient pressures, the 18th International Conference on Flow Dynamics (2021)

[4] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Emission Characteristics of Liquid Ammonia and Gaseous Ammonia Flames Co-fired with Gaseous Hydrogen in a Gas Turbine-like Combustor at Moderately High Pressure, the 19th International Conference on Flow Dynamics (2022).

国内学会・研究会等

[1] K.D.K.A. Somarathne, S. Colson, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Numerical study on effects of ammonia fuel fraction in liquid ammonia/hydrogen/air co-combustion at high pressure, 第 59 回燃焼シンポジウム (2021).

[2] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Numerical investigation towards the development of liquid ammonia/air spray combustion in a gas turbine-like combustor, 第 60 回燃焼シンポジウム (2022).

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 無し

無し

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR03APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年02月27日提出

温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた

ガソリン代替合成燃料・電解液溶媒・アンモニアの着火・燃焼特性

に関する研究

中村 寿 東北大学流体科学研究所 准教授

村上 雄紀 東北大流体科学研究所 博士研究員

秋田 佳祐,金山 佳督,秋葉 貴輝,阿部 一幾 東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 博士学生

玉置 健太,原田 拓実 東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 修士学生

> 丸田 薫 東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

本研究では、カーボンニュートラルなガソリン代替合成燃料及びカーボンフリー燃料であるアンモニアの実機への適用や可燃性を有する電解液の発火防止を目的とし、各種ガソリン 代替合成燃料、電解液溶媒、アンモニアの着火・燃焼特性の調査を行う.研究には当該研究 室の独自手法である温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いる.マイクロフローリア クタは、消炎直径以下の内径を有する石英管と外部熱源により構成され、火炎が自発的な着 火・消炎を繰り返す非定常火炎や、微弱な発熱を有する定在火炎といった特異な性質を有す る火炎を観察可能な実験装置である.この実験手法を用いることにより,従来の燃料解析手 法では困難であった燃料固有の反応温度や反応過程について調べることができる.またリア クタ内の気相温度を外部熱源により強く拘束するため,反応性の低い燃料に対しても燃焼特 性の調査が可能である.数値計算においても管内流れが1次元とみなせること,温度分布が 拘束されていること,解析領域のスケールが小さいことなどから,従来の手法に比べ詳細な 反応過程の調査が可能である.以上の特徴を活かし,各種燃料の着火特性の調査及び着火に 寄与する反応経路の特定を行い,反応モデルの検証および修正を行うとともに,修正反応モ デルを用いて実機燃焼器における最適な燃焼条件の探索を行う.

1.2 研究期間内の最終目標

温度分布制御型マイクロフローリアクタを模擬した数値シミュレーションを実施し,各種 ガソリン燃料,電解液溶媒,アンモニアの着火・燃焼特性に関するデータの取得や,低温化 学反応と動的火炎伝播の相互干渉に関する未発見の燃焼現象の解明を行う.さらに,化学種 計測結果との比較により既存の反応モデルを修正し,高精度なモデルを構築する.修正され た反応モデルは CFD に導入し,安全性の高い電解液溶媒の開発,ガソリンエンジンやアンモ ニアガスタービン燃焼における燃焼条件設計に利用される.

2. 研究成果の内容

2.1 炭酸エチルメチルの反応モデル構築と検証

バッテリー電解液の主成分のひとつである炭酸エチルメチルについて、反応モデルを構築 し、マイクロフローリアクタの計測結果と比較検証した.昨年度の研究成果から、メチル基 とエチル基で反応特性の差異を見い出したことから、炭酸エチルメチルのメチル基側は炭酸 ジメチルから、エチル基側は炭酸ジエチルから、グループ測により反応モデルを構築した. 燃料ラジカルの熱物性は THERM を用いて計算した.図1に構築したモデルによる炭酸エチ ルメチル反応過程における中間体の予測結果と計測結果の比較を示す.構築したモデルは炭 酸エチルメチルの燃焼過程を良く再現することを確認した.なお、本報告書には昨年度まで 在籍した髙橋伸太郎の成果も記載してある.



図1 炭酸エチルメチルの反応モデル検証

2.2 亜酸化窒素(N₂O)の分解,反応特性の調査

亜酸化窒素(N₂O)はアンモニアを燃焼させた際に排出が懸念されている窒素酸化物の一 種である. N2O は CO2 の約 300 倍の温室効果を持つ物質であるため, アンモニア燃焼の実用 化にあたって N2Oの排出制御が求められている. N2O は通常の燃焼方法であれば熱により分 解されほとんど排出されない、しかし工業炉などで高効率な燃焼方法として用いられている 高温空気燃焼と呼ばれる燃焼方法では局所温度が高い領域が存在しないため、熱による分解 が進まずに N₂O が排出されてしまう可能性がある.本研究では N₂O を対象とし、1400K 以 下でのAr, CO₂, H₂O 存在下での熱分解特性および N₂O を酸化剤として用いた際の燃料と の反応特性について調査した.熱分解特性に関しては、実験よりH2O存在下でN2Oの分解 が最も促進されることが分かり,数値計算によってCO₂,H₂Oの三体係数を新たに定義した. 新たに定義した三体係数を用いた数値計算結果と実験結果を比較した図を図2に示す.新た に定義した三体係数を用いると数値計算において実験結果を精度よく再現可能であることが 確認できる.燃料との反応特性に関しては、実験よりメタンよりもエタンとアンモニアの方 が N₂O の消費を促進することが分かった.この理由について数値解析を行い、エタンの場合 は N2O の消費に重要な H ラジカルがより低温で生成されやすいこと、アンモニアの場合は アンモニア酸化過程で最初に生成される燃料ラジカル(NH2)が直接的に N2O を消費するこ とが分かった.



図2 N₂O熱分解における実験と数値計算の比較

3. 研究目標の達成状況

当初の研究目標をおおむね達成することが出来た.

4. まとめと今後の課題

温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた実験と数値計算の比較により、炭酸エチル メチルのモデル検証を行い、N2Oの熱分解特性、燃料と反応させた際の反応特性について調査 することが出来た.引き続き、各種燃料の実機燃焼器適用に向け、様々な混合気に対して着火・ 反応特性の調査を行う予定である.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は,初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Shintaro Takahashi, Keisuke Kanayama, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Study on Oxidation and Pyrolysis of Carbonate Esters using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile. Part II: Chemical Kinetic Modeling of Ethyl Methyl Carbonate, Combustion and Flame, Vol.238, (2022), 111878.

Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kenji Hiraoka, Kaoru Maruta: Effects of mixture composition on oxidation and reactivity of DME/NH3/air mixtures examined by a micro flow reactor with a controlled temperature profile, Combustion and Flame, Vol. 238, (2022), 111911.

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Experimental and Modeling Study on Pyrolysis of Ethylene Carbonate/Dimethyl Carbonate Mixture, Combustion and Flame, Vol. 245, (2022), 112359.

著書

該当なし

国際学会

Takaki Akiba, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Numerical method using Carleman linearization for ODEs of chemical reactions toward quantum computation, 18th International Conference on Numerical Combustion, (2022.5.11), 127NMQ-0045.

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Shota Morikura, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Thermal Decomposition-induced Multi-stage Reaction of Diethyl Carbonate Examined by a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 28th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS 2022), (2022.6.20) Proceedings of the 28th ICDERS, #167.

Keisuke Akita, Youhi Morii, Yuki Murakami, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Dynamics of FREI with/without cool flame interaction, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.29), PROCI-D-22-01380.

Takaki Akiba, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Numerical method for ODEs of chemical reactions with Carleman linearization toward quantum computings, 39th International

Symposium on Combustion, (2022.7.25), 1P002.

Takumi Harada, Yuki Murakami, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Hisashi Nakamura: Study on rate constant of N2O consumption using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.28), 3P015.

Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Theoretical calculations for decomposition of gas-phase ethylene carbonate and species measurements for pyrolysis of ethylene carbonate doped with dimethyl carbonate, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.28), 3P020.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Role and impacts of N2H2 reactions on ammonia oxidation with H2O addition, 39th International Symposium on Combustion, (2022.7.28), 3P044.

Yuki Murakami, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Investigations on extinction limits of CH4/NH3 nonpremixed counterflow flames with high-temperature air, 1st Symposium on Ammonia Energy, (2022.9.1), CF04.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Experimental and kinetic modeling studies of NH3 oxidation using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, KAUST-Tohoku University-Orléans core-to-core workshop, (2022.9.26).

Takaki Akiba, Youhi Morii, Kaoru Maruta: Numerical integration approach with Carleman linearization for chemical reactions and combustion toward quantum computation, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.9), OS2-3.

Kenta Tamaoki, Yuki Murakami, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Kinetic study on ammonia oxidation with H2O addition using a micro flow reactor controlled with acontrolled temperature profile, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.10), OS2-5.

Takumi Harada, Yuki Murakami, Kenta Tamaoki, Keisuke Kanayama, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Study on N2O reactions with H2 and CH4 using a micro flow reactor with a controlled temperature profile, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.10), OS2-6. Yuki Murakami, Takuya Tezuka, Hisashi Nakamura: Extinction limits of CH4/NH3/N2 versus high-temperature air nonpremixed counterflow flames, 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), (2022.11.10), OS2-9.

国内学会・研究会等

原田拓実,村上雄紀,金山佳督,玉置健太,中村寿:温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた N2O 熱分解に関する研究,日本伝熱学会,(2022.5.20),A344.

秋葉貴輝,角田陽,佐川和孝,手塚卓也,中村寿,菊池政雄,丸田薫:包括的燃焼限界理論に 向けた低ルイス数予混合気による極低流速対向流火炎の軌道上実験と数値的検討,日本機械 学会熱工学コンファレンス 2022, (2022.10.9), H221.

玉置健太,村上雄紀,金山佳督,手塚卓也,中村寿:温度分布制御型マイクロフローリアク タを用いたH2O添加がアンモニア酸化に及ぼす影響に関する研究,日本機械学会熱工学コン ファレンス 2022, (2022.10.9), H212.

玉置健太,村上雄紀,金山佳督,手塚卓也,中村寿:温度分布制御型マイクロフローリア クタを用いたアンモニア改質反応に関する研究,日本燃焼学会第60回燃焼シンポジウム, (2022.11.22), B211.

原田拓実,村上雄紀,玉置健太,金山佳督,手塚卓也,中村寿:温度分布制御型マイク ロフローリアクタを用いた N2Oと H2 及び低級炭化水素の反応に関する研究,日本燃焼学会 第 60 回燃焼シンポジウム, (2022.11.22), B232.

秋葉 貴輝, 森井雄飛, 丸田 薫: 量子コンピュータ利用に向け Carleman 線形化による化学反応数値積分法の検討, 日本燃焼学会第 60 回燃焼シンポジウム, (2022.11.23), A321.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR04APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年07月20日提出

SI エンジンの高効率化に向けた異種燃料添加による燃焼促進効果の調査

森井 雄飛, 丸田 薫

東北大学流体科学研究所 助教,教授

秋田 佳祐,角田 陽,佐川 和孝,橋本 彩夏,廣瀬 海音 東北大学流体科学研究所 D3, D1, M2, M2, M1

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

ガソリンエンジンの高効率化に向けて,希薄運転限界を拡大することで熱効率を大幅に向 上させる大規模共同研究が進められている(SIP→AICE). SIP では火花点火エンジンの熱 効率が,世界最高の51.5%を達成するなど,希薄燃焼を利用した実用燃焼技術の持つ潜在能 力が示されている.希薄運転限界を拡大するには,希薄化により困難となる着火核から火炎 伝播への遷移を理解する必要がある.また,ノッキング(未燃予混合気中での意図しない着 火等の異常燃焼)の理解は,高効率なガソリンエンジンの開発において重要であるが,まだ 十分に理解されていない.さらに,脱炭素社会実現に向けて,炭化水素燃料にアンモニア (NH₃)を混合した燃料の利用が検討されている.これまで炭化水素燃料やNH₃の単体での 基礎燃焼特性については,様々な研究が進められてきているが,混合燃料の研究例は依然と して限定的である.

希薄限界近傍での火炎挙動とノッキングの理解

希薄運転限界拡大のためには、燃焼限界近傍での火炎挙動を正確に理解することが重要で ある. Flame ball は、伝播火炎の燃焼限界よりも低い燃料濃度の条件で存在が確認され、こ れを利用することで大幅な希薄運転限界の拡大が見込まれる.本研究グループではこれまで、 対向流場の流速を拡散流速と競合する極低流入流速条件まで減少させることで、流れ場中に 定在する伝播火炎と静止予混合気中に定在する Flame ball との存在領域が漸近するとの仮 定の元、微小重力実験と数値計算を実施してきた.また、ノッキングは、ガソリンエンジン の開発において重要であるが、化学反応と流体力学の複雑な相互作用による結果であるので、 いまだに現象理解が進んでいない.そこで、信頼性の高い素反応を考慮した直接数値計算と、 燃焼現象の核心を抽出した非定常大規模計算モデルによる解析を複合して、実機開発に資す る燃焼現象の解明を目指す.

CH4/NH3混合気の燃焼解析に向けたモデル構築

脱炭素社会の実現に向けて,環境負荷の小さい天然ガスとNH3の混合燃料の利用が期待されている.燃焼解析を実施するには化学反応を効率的に解くことが求められるが,その際低計算負荷の化学反応モデルが必要となる.本研究では,従来の低計算負荷モデルの構築手法に対しさらに解析負荷を低減させることが可能な独自の手法を採用しモデル構築を行い,その構築したモデルの有効性を調査する.

1.2 研究期間内の最終目標

希薄燃焼技術によるガソリンエンジンの高効率化に向け、燃焼限界近傍の火炎挙動とノッキング現象を明らかにする.更に、脱炭素社会実現に向けて、CH4/NH3混合気の燃焼を新手法により計算負荷を大幅に低減させることで CFD 解析を実現する.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

希薄限界近傍での火炎挙動とノッキングの解析

研究室内製の3次元非定常計算コードを用い,対向流場中の淀み点上に Flame ball を配置 し,対向流場流速を変化させ,着火・火炎伝播過程解析を実施した.淀み面に向かって Flame ball が押しつぶされた後,平面火炎に至る条件に加え,2種類の消炎形態が確認された. 一 つは,リング状の火炎が淀み面と並行に進展し,消炎に至った.もう一つは一度平面火炎が 形成されるものの,バーナ軸に近い位置で反応速度が減少し,反応速度の低い領域が穴のよ うに拡大し消炎に至った.これらの消炎は一般的な対向流平面火炎が存在し得る流速条件で あっても確認され,希薄運転時の着火・火炎伝播過程を解明する上で更なる解析の必要性が 示された.更なる着火火炎伝播過程調査のため,よどみ面に Flame ball (拡散律速のなだら かな温度分布)ではなく Flame ball 特徴半径と同じ半径を有する高温球熱源を配置した計算 も実施した.Flame ball を配置した際と同様に,バーナ軸に近い位置で反応速度が一度減少 したが,熱源の温度によっては反応速度が再び上昇し最終的に平面火炎が形成された.反応 速度が再び上昇を開始する位置によって,その後消炎に至るかどうかが変化した.また,ノ ッキングに関しては,2点点火だけでなく,1点点火のノッキング実験を定量的に再現する ことに成功しており,点火方式の違いによるノッキング発生メカニズムの詳細な検討が可能 である.

CH4/NH3混合気の燃焼解析に向けたモデル構築

0 次元計算(ANSYS Chemkin-Pro の AURORA パッケージを使用)および一次元の定常計 算(ANSYS Chemkin-Pro の PREMIX パッケージを使用)を実施し、化学反応モデル構築 の際に目標とするデータの取得を行った.取得したデータを基に低計算負荷の簡易化学反応 モデルの構築を行った.構築したモデルは CH4/NH3 混合気を対象とした.結果、構築した簡 易化学反応モデルは詳細化学反応機構に対して化学種数を 1/10 程度に削減し、0 次元計算に おける着火遅れ時間、NO モル濃度、NH3 モル濃度および 1 次元計算における層流燃焼速度 を高い予測精度で再現することに成功した.モデルの化学種数は化学反応モデルの計算負荷 に大きな影響を与えるため、このモデルにより計算負荷の低減効果が期待できる.また、 CH4/H2 混合気に対しても同様のコンセプトで簡易化学反応モデルの構築を行い、14 化学種 で水素混焼率 30-100%に対して、高い予測精度のモデルを構築することに成功した.なお、 CHEMKIN の Reaction work bench に搭載の従来法(DRGEP 法)で同程度の予測精度のモ デルを作成した場合、37 化学種が必要となるため、当手法により構築したモデルは従来法に より構築したモデルに比べ、計算負荷を 25%以上低減できると期待される。

3. 研究目標の達成状況

Flame ball を初期解とした対向流場中の着火・火炎伝播形成過程は、対向流場流速に依存 して、大きく変化することが示された.宇宙実験に先立ち、淀み点状に形成された理想的な Flame ball が流速の影響を受けてどのように変化するかについて、明らかになった.また、 ノッキングに関しては、直接数値計算を実施することで、複数のケースで実験を定量的に再 現することに成功した.

また, CH4/NH3 混合気の燃焼を再現する低計算負荷の化学反応モデルについて, 新手法に より従来法より化学種数の少ない化学反応モデルの構築に成功し、計算負荷を大幅に低減さ せること成功した.また, CH4/H2 混合気に対しても,当モデル構築手法により計算負荷を削 減できることを確認した.

4. まとめと今後の課題

対向流場における着火・火炎伝播遷移過程は,初期の着火核などへの強い依存性を有する ことが明らかになった.本研究で得られた計算結果を,宇宙実験にて実際に確認し燃焼限界 近傍における火炎動態を明らかにする.ノッキングに関しては,後処理を進めつつ,必要な 条件抽出をすることで,重要なケースに対して直接数値計算を実施する.

また,化学反応モデル構築の新手法により,CH4/NH3 混合気を再現する低計算負荷モデル の構築に成功した.今後,0次元計算および1次元計算での予測精度の向上と、モデルを適用 できる範囲の拡大を目指す。また、CFD に適用した際の計算時間や予測精度の検証を進めて いく予定である.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Computational study on lean and rich combustion of flame ball, counterflow flame and planar flame: Their limits and stoichiometries, Proceedings of The Combustion Institute, Vol. 39, Issue 2:1937-1944(2023).

著書

特に無し

国際学会

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura Kaoru Maruta, DNS study on knocking initiation induced by acoustic waves interacting with tulip-like flame, The 18th International Conference on Numerical Combustion, 2022.

Kaito Hirose, Koji Shimoyama, Hisashi Nakamura: Generating a compact model for methane and natural gas using genetic algorithm and abbreviated reaction pathways, WIP Poster, 39th International Symposium on Combustion, (2022).

Kaito Hirose, Yuki Murakami, Koji Shimoyama, Hisashi Nakamura: Generating Compact Reaction Models for Methane and Natural Gas Using Genetic Algorithms, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, (2022).

Kazutaka Sagawa, Takaki Akiba, Akira Tsunoda, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru Maruta, Numerical analysis of flame behavior initiated from flame ball in weakly-stretched counterflow field, 39th International Symposium on Combustion, WIP Poster, Vancouver, Canada, 25 July 2022.

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura Kaoru Maruta, Detail analysis of experimentally verified 2D-DNS for knocking in a constant volume vessel with n-heptane fuel, 39th International Symposium on Combustion, WIP Poster, Vancouver, Canada, 25 July 2022.

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Computational study on lean and rich combustion of flame ball, counterflow flame and planar flame: Their limits and stoichiometries, 39th International Symposium on Combustion, 1B10, Vancouver, Canada, 25 July 2022.

Akira Tsunoda, Takaki Akiba, Hisashi Nakamura, Youhi Morii, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta, Near Lean/Rich Limits Behaviors and Local Stoichiometries of Flame Balls, Counterflow Flames, and Planar Flames in a CH4/O2/Xe Mixture, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 9 November 2022.

Ayaka Hashimoto, Keisuke Akita, Youhi Morii, Kaoru Maruta, Numerical Study on the Effect of Initial Ignition Condition on Flame Propagation of Dimethyl Ether (DME)/Air Mixture, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 9 November 2022.

Youhi Morii, Ajit Kumar Dubey, Hisashi Nakamura Kaoru Maruta, Numerical Study for Reproducing Knocking Experiment in a Constant Vessel with a Single Spark Igniter, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, Miyagi, 9 November 2022.

国内学会・研究会等

廣瀬海音,村上雄紀,下山幸治,中村寿: 遺伝的アルゴリズムを用いたメタン/水素混焼 用簡易化学反応モデルの構築",第59回伝熱シンポジウム (2022), A325.

角田陽,秋葉貴輝,中村寿,手塚卓也,菊池政雄,丸田薫,L3-FLAME: Flame ball・対向 流火炎・非伸長平面火炎の燃料希薄・過濃限界に関する数値的研究,日本マイクログラビテ ィ応用学会 第34回学術講演会,愛知県,2022年9月14日.

角田陽,秋葉貴輝,中村寿,森井雄飛,手塚卓也,丸田薫,Flame ball・対向流火炎・非伸 長平面火炎の希薄・過濃燃焼特性:燃焼限界と"essential stoichiometry",第60回日本燃焼 シンポジウム,東京,2022年11月21日.

佐川和孝,秋葉貴輝,角田陽,森井雄飛,中村寿,丸田薫, Flame ball および球状熱源を初 期解に用いた対向流場中の火炎挙動の数値解析,第60回日本燃焼シンポジウム,東京,2022 年11月21日

橋本彩夏,村上雄紀,森井雄飛,秋田佳祐,中村寿,丸田薫,DME 空気予混合気における 初期着火条件と着火火炎伝播遷移家庭に関する数値的研究,第60回日本燃焼シンポジウム, 東京,2022年11月21日.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 特になし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR05APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.4 \sim 2024.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月28日提出

らせん渦の不安定化過程の直接数値シミュレーション研究

服部裕司 東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

風車ロータなどの回転翼から発生するらせん渦は、長波長不安定性・短波長不安定性・相互 作用型不安定性などにより不安定化し、最終的には乱流遷移する。研究代表者は、らせん渦 のような曲りをもつ渦について、曲りに起因する曲率不安定性(短波長不安定性)が存在す ることを発見し、そのメカニズムを解明し、実証してきた。本研究は、物理的素過程として の不安定性に基づいて、らせん渦が乱流遷移する過程と遷移後の乱流の性質の体系的な理解 を確立するものである。遷移過程と遷移後の乱流の性質が、らせん渦を特徴づける複数のパ ラメータ(太さ・捩り・軸流・本数・レイノルズ数)と擾乱の性質によってどのように決ま るかを解明する。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) らせん渦が不安定化し乱流遷移する過程と、遷移後の流れの性質を、物理的素過程として の不安定性に基づいて体系的に解明するのが本研究の目的である。らせん渦を特徴づける複 数のパラメータに対する依存性の全貌を明らかにする。3 種類の不安定性が直接的に乱流遷 移を引き起こすのか、それとも 2 次不安定性や遷移成長によるバイパス遷移が原因となるの かを突き止め、遷移過程とヘリシティが遷移後の平均流や乱流ゆらぎの統計的性質に与える 影響を明らかにする。遷移後にらせん渦が崩壊して発達した乱流となるのか、それとも構造 が残存する弱い乱流状態となるのかを決める相図を作るのが最終目標である。

(2) らせん渦によって作られる風車ロータの後流を任意の条件下で予測できれば、風力発電量の正確な予測ができる。これは、欧州のように風力発電のシェアが大きい国において重要なだけではなく、風況が悪い(=一定の強い風が吹く地域が限られている)我が国においても重要である。なぜならば、発電量が不安定で予測しがたいために電力グリッドに組み込むのが難しいことが、風力発電普及を妨げる一因となっているからである。また、乱流ゆらぎは風車ロータの振動を引き起こし、性能劣化や疲労故障の原因となる。乱流ゆらぎの性質を明

らかにすることで、ロータ寿命の予測や制振機構の開発による長寿命化、さらには運転範囲 の拡大につなげる。

(3) らせん渦の研究は、風力発電の普及とともに広がりつつある。しかし、その多くは応用を 目的とした平均流れに関するものである。基礎研究としては、らせん対称性を仮定した運動 学の研究や線形安定性解析が行われてきた。しかし、基礎研究の立場から乱流遷移過程と遷 移後の流れまでを体系的に理解しようという研究は世界的にもほとんどない。らせん渦の複 数のパラメータに対する依存性を網羅的に調べることは困難である。本研究により、乱流遷 移過程の物理的メカニズムに基づく理解を可能とすることで、風力発電量の予測や風車ロー タの設計などの応用への道を切り拓く。

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - 2.1 らせん渦の線形不安定性に対する捩りの向きの影響

Here we show some results on the effects of the axial-flow direction on the instability of a helical vortex. Although the axial-flow direction does not affect the instability of a vortex ring which can be regarded as a helical vortex with zero torsion, there can be $O(\varepsilon)$ correction to the peak wavenumbers and the growth rate for the unstable modes of a helical vortex since torsion breaks symmetry with respect to mirror reflection. We focus on the curvature-instability mode of (-1, 0; [2, 4]). The values of the parameters are set to $\varepsilon = 0.1$, $W = \pm 0.2$, N = 1, $Re_{\Gamma} = 6.28 \times 104$, while three values are considered for L/R: 0.3, 0.5 and 0.7.

Fig. 1 shows the growth rates plotted against the wavenumber k for W = +0.2 and -0.2. For positive axial flow, the unstable wavenumber range is shifted to small k, while it is shifted to large k for negative axial flow. The differences in the peak wavenumbers of the positive and negative cases increase with L/R. The differences are in good agreement with theoretical prediction $\Delta k = -0.84\epsilon(L/R)$, where the coefficient 0.84 is specific to the curvature-instability mode of (-1, 0; [2, 4]). The maximum growth rate is smaller for W = +0.2 than for W = -0.2 when L/R = 0.3, while it is larger for W = +0.2 than for W = -0.2 when L/R = 0.5 and 0.7. This behaviour of the growth rate is most likely caused by the O(ϵ^2) base flow field, which depends on the torsion in a complicated way.



Fig. 1 成長率の波数依存性。+: W=+0.2, 〇: W=-0.2. L/R=0.3 (赤), 0.5 (緑), 0.7 (青).

3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げている。

4. まとめと今後の課題

らせん渦の線形安定性について、特に軸流の向きの影響を数値解析により調べた。渦輪には存 在する鏡像反転対称性が捩りによって破られ、軸流の向きによって異なる不安定特性があらわ れることを示した。不安定となる波数領域のシフトは理論による予測とよく一致する。成長率 への効果はひずみが捩りに強く依存するため単純ではないこともわかった。 今後はらせん渦の乱流遷移過程が、らせん渦の特性を決めるパラメータ(太さ、ピッチ、軸流、 本数、レイノルズ数)と不安定モードによってどのように依存するかを数値シミュレーション

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

と理論の両面から明らかにしていくことが課題である。

学術雑誌(解説等を含む)

Yuji Hattori and Makoto Hirota, "Stability of two-dimensional Taylor-Green vortices in rotating stratified fluids," to appear in J. Fluid Mech.

著書

国際学会

Y. Hattori, I. Delbende, M. Rossi, "Study of Turbulent Transition and Statistical Properties of Turbulence of Destabilized Helical Vortex," 22th International Symposium on Advanced Fluid Information, 2022.

Yuji Hattori, "Turbulent transition of helical vortices destabilized by short-wave instability," 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2022.

Yuji Hattori, "Instability of Curved Vortices," International Workshop on Turbulence, Vorticity Dynamics and Wind Energy, 2022.

国内学会・研究会等

服部裕司, Ivan Delbende, Maurice Rossi, らせん渦の線形不安定性における軸流の向きの効果, 日本流体力学会年会 2022.

服部裕司, 短波長不安定性による渦輪の乱流化過程, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, 2022.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR06APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.4 \sim 2024.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月27日提出

圧縮性流れ高精度数値解法による空力騒音低減の数値シミュレーション

研究

服部 裕司

東北大学流体科学研究所 教授 山本 泰平、中田 圭亮、嶋﨑 渉

東北大学大学院情報科学研究科 D1, M2

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

従来の空力騒音低減対策は、技術者・研究者のノウハウと試行錯誤に基づいて、対症療法的 に行われることが多かった。これに対し、自動的な最適化を実現する本開発手法は人間のア イディアの限界を超えた革新的な形状を生み出すことができる。しかも、応用上のさまざま な制約下で、騒音低減と同時に維持したい性能も考慮できる。このため、本研究により開発 手法の有効性が示されれば、幅広い産業応用において騒音低減法の革命を起こすことが期待 される。これは機器の高速化・高度化を進める原動力となり得る。例えば、新幹線は騒音レ ベルで最高速度が制限されているが、騒音を 5dB 低減できれば、時速を 300km/h から 375 km/h に増加させることが可能である。

1.2 研究期間内の最終目標

(1) 流れと物体の相互作用により発生する空力騒音を低減するために、革新的な物体形状最 適化法を開発するのが本研究の目的である。

機器の高速化により、主な騒音が空力騒音である場合が増加している。例えば、自動車の 場合、エンジンの静音化に伴い、車内騒音はサイドミラーなど車外で発生する空力騒音が支 配するようになっている。新幹線の場合、パンタグラフなどから発生する空力騒音が走行速 度を制限している。このため、空力騒音の低減が重要な課題の一つとなっている。

本研究では、埋め込み境界法とアジョイント法の融合により、空力騒音低減のための形状最 適化法を開発する。埋め込み境界法により任意の物体形状の表現が可能である。また、アジ ョイント法により最急降下法による効率的な最適化ができると同時に、形状に対する制約条 件も取り入れることができる。騒音低減と同時に抵抗の増加を抑えたい場合などの多目的最 適化問題への応用も容易である。さらに、数値シミュレーションによるため、低コストであ る。これにより、今までに人間が考えつかなかったような形状を生み出し、空力騒音を格段 に低減する革新的な最適化法を開発する。

(2) 応募者は空力音の直接数値シミュレーション(DNS)に数多くの実績を持つ。空力音の DNS は音圧を支配方程式(圧縮性ナビエストークス方程式)の解として直接得るものである。 音圧は大気圧に比べて小さいため(120dBの騒音で音圧/大気圧=0.04%)、普通の数値解法で は数値誤差にまぎれて捉えることができない。そのため高精度解法と高品質の格子を必要と する。応募者は 1990 年代に国内でいち早く空力音の DNS に取り組み、現在まで実績を重 ねてきた。

2016年に応募者らが開発した修正 Volume Penalization (VP)法は、埋め込み境界法と高 精度解法を両立させたものである。これにより、流れの中に複雑な形状の物体や、運動・変 形する物体が存在する場合に空力音を直接捉えることが可能となり、主として基礎研究にと どまっていた空力音の DNS の適用範囲を工学応用に拡大した。

本研究で扱う流れは一般に複雑な形状の物体を含む。この系で音を高い精度で直接捉えら れる方法は極めて少ない。また、実験では物体形状の最適化がコストの面で難しいのに対し、 DNS では容易である。修正 VP 法を開発した応募者が取り組むべき挑戦的な課題である。 (3) 最適化のために導入するアジョイント法は、これまで時間変化がない定常問題を中心に 適用されてきたが、近年計算機性能の向上により非定常問題への適用が進みつつある。しか し、音波を直接捉える高精度解法にアジョイント法を導入して物体形状最適化を行うのは、 本研究が世界初である。

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 アジョイント法による空力騒音低減のための形状最適化法の開発

自動車の走行時には様々な騒音が発生する。特に空力騒音は技術の進展に伴って支配的な騒音 源となるとされており、対策が必要である。しかし空力現象はその発生原因が多岐にわたってお り、設計者の試行錯誤による対策には限界がある。そのため自動設計の技術が考案されてきた。 その中の1つにアジョイント法がある。この手法は1度に多数の設計変数を対象に最適化を行う 際に有利である。本研究では空力音の直接数値計算に基づくアジョイント法による空力音低減の ための形状最適化の実装を目的とした。

本研究では自動車の強い空力音源であるサイドミラーを模したモデルを形状最適化の対象とした。このモデルでは流れに対して上流側の形状を点群のつなぎ合わせで表現し、後流側はミラーの取り付け部を想定して固定部とした。空力音の評価はモデルから距離80の円で観測される音響パワーの大きさで行った。

Fig. 1 には本研究におけるモデルの形状更新履歴および形状更新毎の音響パワーの履歴を示す。 この結果からアジョイント法によって形状が更新され、発生する空力音を低減したことが確認さ れた。ここでは 39 回目の形状更新において音響パワーの最小値を確認した。一方で形状更新があ る程度進むと、一部の設計変数が振動することが確認された。また変形部の内、音響パワーへの 影響が大きい部分にマスク関数が不連続となる形状がある場合に 39~40 回目の形状更新に見ら れるような意図しない目的関数の推移が生じる可能性が示された。



Fig.1 モデルの形状更新履歴(左図)および形状更新毎の音響パワーの履歴(右図)

2.2 多孔質材貼り付けによる空力騒音低減効果の直接数値シミュレーション研究 本研究では、円柱周り流れから発生する空力音を円柱に多孔質材を貼り付けることにより低 減できるかどうかを直接数値シミュレーションにより研究した.先行研究では2次元低レイ ノルズ数の場合には多孔質材貼り付けによる低減が確認されているが、流れ3次元的になる 中間もしくは高いレイノルズ数流れにおける低減効果を検証し、低減のメカニズムにを明ら かにすることには大きな意義がある.そのため、レイノルズ数が1000、マッハ数が0:2の場 合に(1)多孔質なしの円柱流れ、(2)多孔質1(2次元低レイノルズ数の場合に最も低減効果が あったもの)を貼り付けたもの、(3)多孔質2(3次元化を促進するように多孔質を配置)を貼 り付けたものの3通りの場合を調べた.その結果、多孔質1、多孔質2の場合ともに音響パ ワーは多孔質なしの場合の約1/4に低減されることが示された(Fig.2左).多孔質1の場 合は、境界層が円柱表面と多孔質の部分の2箇所に分かれて形成される.そのため、一つの 渦層が弱くなり、円柱背後に形成される渦が弱くなる.その結果、強い孤立渦の発生が後退 するのが空力音低減のメカニズムである。これに対し、多孔質2の場合は、多孔質の部分か らやや厚い渦層が安定して定常的に伸びる.このため、渦形成が後流に遅れ、孤立渦の発生 が下流に後退することが空力音低減のメカニズムである。



Fig.2 (左) 音圧の指向性の比較、(右) 多孔質貼り付け時の渦度分布

3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げている。

4. まとめと今後の課題

アジョイント法による空力騒音低減のための形状最適化法の開発においては、物体形状の表現が容易である修正 VP 法の特性を活かし、2 次元低レイノルズ数の場合に空力音低減が可能であることを実証した。今後はより実用に近い3次元流れにおける実証が課題である。

多孔質材貼り付けによる空力騒音低減効果の直接数値シミュレーション研究においては、2 次元低レイノルズ数の場合にとどまっていた多孔質材貼り付けの空力音低減効果を、3次元中 間レイノルズ数の場合に示すことができた。また、空力音低減のメカニズムを明らかにした。 今後は多孔質材貼り付けの最適化を行い、低減効果を大きくすることが課題である。

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

著書

国際学会

国内学会・研究会等

山本泰平,服部裕司,Ranque-Hilsch ボルテックスチューブに生じる流れとエネルギー分離 現象の関連性,日本流体力学会年会 2022.

嶋崎 渉,服部裕司,アジョイント法による空力騒音低減を目的とする形状最適化:形状表現の改良の効果,第36回数値流体力学シンポジウム,2022.

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

2023 年1月12日,第36回数値流体力学シンポジウム若手優秀講演表彰、嶋崎渉「アジョ イント法による空力騒音低減を目的とする形状最適化:形状表現の改良の効果」(日本流体力 学会)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR07APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.4 \sim 2024.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月27日提出

機械学習による乱流モデルの開発と乱流制御の数値シミュレーション研

究

服部 裕司 東北大学流体科学研究所 教授

Golsa Tabe Jamaat, Ayapilla Aditya Sai Pranith, 阿部 哲弥, 小澤 郁真, 平野 晃大

東北大学大学院情報科学研究科 D2, M2

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

機械学習を乱流モデルの開発に応用するアイディアはこれまでにもあったが、その多くは機 械学習を補助的に用いるものであった。乱流モデルの関数形そのものを求めようという本格 的なモデリングはわれわれの研究(Gamahara and Hattori, Phys. Rev. Fluids, 2017)が世界 初である。この論文の FWCI (Field Weighted Citation Impact)は 6.67 (2022 年 2 月現在) であり、先駆けとなったこの研究に対する注目度の高さを示している。

本研究はこの成果をきっかけとして、実用可能な高精度乱流モデルを開発するものである。 これにより、数値流体力学の利用範囲を拡大することができる。工業製品の設計開発に利用 できるようになれば、開発のコストを削減し、期間を短縮できるため、生産性の大幅向上に 貢献できる。さらに、強化学習などの機械学習法による乱流制御法の開発は、革新的な抵抗 低減法などへの道を拓く。機械学習の技術が発展し、計算機性能が充実した今こそ行うべき 研究である。

- 1.2 研究期間内の最終目標
 - (1) ニューラルネットワーク(ディープラーニングを含む)などの機械学習により乱流モデ ルの開発を行う。壁乱流の LES 解析のための乱流モデルを開発する。また、宇宙・惑星規模 の乱流への応用のため回転成層乱流の LES 解析のための乱流モデルを開発する。さらに凹面 上の壁乱流の抵抗低減のため、強化学習やアジョイント法に基づく制御法の開発を行う。
 - (2) 流体解析の多くは数値計算コスト上の問題により格子以下の現象を乱流モデルとして表

現することにより行われる。しかしながら、乱流モデルの精度はモデルの選択や流れの種類 に依存しており、万能な乱流モデルは存在しない。われわれは、よりよい乱流モデルの開発 に機械学習を用いる研究を行っており、これまでに学習およびモデルの開発が原理的には可 能であることを示した(Gamahara, Hattori, 2017)。本研究はこれを発展させ、機械学習の 結果に基づいて物理モデルをして定式化すると同時に、機械学習モデルを数値シミュレーシ ョンに実装する方法を確立する。

(3) 機械学習の応用範囲の拡大により、最近になって乱流研究への応用は増えてきたが、乱 流モデルの開発への応用は世界的にも少なく、ユニークな研究である。本研究は、これまで 人間の考えの及ぶ範囲に限られていた乱流モデルを超える(=人智を超える)革新的なモデ ルを提案し、さらに制御への応用を実現するものである。これまでにない発想のモデルによ り精度を格段に向上させ、乱流数値解析の飛躍的な進化につながるとともに、革新的な乱流 制御技術を提案することができる。

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 Wall modeling in LES using convolutional neural networks

The ability of convolutional neural network (CNN) in establishing a wall model for the LES of turbulent channel flow is investigated. To provide the training dataset, the DNS is performed for the turbulent channel flow at $Re_{\tau} = 400$. After optimizing the hyperparameters of CNN, two skip-connected layers, 62 number of filters and the filter size of 9*9 are chosen for the CNN.

Based on the parametric study on the CNN inputs, 2 sets of inputs are selected and to check the effect of the wall-normal distance (h) shown in Fig. 1 on the CNN models, two different ranges of h^+ are chosen for the input data. The correlation coefficient (CC) for the models is shown in Table 1. The models are shown to be successful when tested under various conditions like a higher Reynolds number. However, they are less accurate when h^+ is considerably outside of their training range. On the



whole, the inner layer models (I1, I2), especially I1, are shown to be more successful than the other models. As an



example, the distribution of the wall shear stress (τ_w) and the joint PDF are shown in Fig. 2 for the model I1 for $h^+ = 17.89$. Comparing the results with the filtered DNS data shows the ability of I1 in predicting τ_w .

Table 1 CC for the training and validation datasets for the chosen CNN models

Case	inputs	Input data range	$\mathrm{CC}_{\mathrm{tr}}$	$\mathrm{CC}_{\mathrm{val}}$
I1	и, ди/ду, uv, h	$h^+>10, h/\delta<0.1$	0.9324	0.9172
L1	и, ди/ду, uv, h	$h^+>30, h/\delta \lesssim 0.15$	0.8802	0.8558
I2	u, v, w	$h^+>10, h/\delta<0.1$	0.9149	0.8997
L2	u, v, w	$h^+>30, h/\delta \lesssim 0.15$	0.8514	0.8308



Fig. 2 From left: distribution of τ_w for filtered DNS and I1, joint PDF of τ_w

2.2 Development of turbulence model for two-dimensional turbulence We developed two physics-based data driven frameworks to model subgrid scale closure in three cases of forced two-dimensional turbulence given in the table below, designated by the shorthand names H4096S, N4096L, N4096LD:

Case	k,	Ver	ν.,	Simulation
	3		20	duration in t/τ
H4096S	29	6.1 × 10 ⁻²³	0	150
N4096L	3	8.3×10^{-6}	0	110
N4096LD	3	8.3×10^{-6}	0.2	220

 k_f refers to the forcing wavenumber, v_{ω} refers to the kinematic viscosity and v_u to the large-scale

diffusion coefficient. 'H' indicates the presence of hyperviscosity, 'N' for Newtonian viscosity, 'L' for large-scale forcing, 'S' for small-scale forcing and 'D' for the presence of large-scale drag. The DNS simulations, supplemented by OpenMP and MPI parallelization are carried out on the supercomputer with 4096 Fourier modes in both the directions, for all the above cases. The DNS data is used for training and testing the designed data driven frameworks named *sigma* and *source* and are tested for their performance in *a priori* and *a posteriori* tests. While the model *sigma* aims to learn the subgrid vorticity transport vector from the resolved flow variables, the model *source* learns the subgrid forcing directly. For the *a priori* test, we evaluated the frameworks' performance by computing correlation coefficients for tow filter widths: $\Delta_F = 16\Delta_{DNS}$ and $\Delta_F = 32\Delta_{DNS}$, where Δ_F is the filter size and Δ_{DNS} is the DNS grid size. For the filter width ratio of 16, the correlation coefficients for H4096S are shown below in fig 3. Note that as shown in the figure, the correlations of the subgrid vorticity transport vector σ_i , subgrid forcing Π , and the Enstrophy fluxes Z are are calculated. The *a posteriori* test results in the form of energy spectrum for the case N4096LD and filter width ratio of 16 are also shown below in fig 4. Note that some ad hoc post processed models are also added in for comparison.



Fig. 3: Correlation coefficients

2.3 平面/凹面上における圧縮性乱流境界層の壁面温度による制御に関する研究

本研究では航空機表面の粘性抵抗低減への応用を見据えて、新たな境界層制御手法として、 壁面温度による制御を提案する。有用性を検証するために、平面/凹面上において3次元の圧縮 性乱流境界層に壁面の加熱/冷却を導入して流れの変化を調べた。計算は直接数値シミュレーシ ョン(DNS)により行った。

平面上の流れについて、各壁面温度における摩擦抵抗を Fig.5 左図に示す。ここでの摩擦抵抗 は、スパン方向平均によって計算されており、Tot基本流の温度を表す。摩擦抵抗は加熱によ って増加し、冷却によって減少することが分かった。また、壁面冷却によって遷移開始位置は 下流側へシフトすることから、流れを安定させる効果があると考えられる。凹面上の流れにつ いて、各壁面温度における摩擦抵抗を Fig.5 右図に示す。凹面上の流れでは、遠心力不安定性 によって Görtler 渦が発生する。Görtler 渦が発生している領域では、摩擦抵抗は加熱によって 減少し、冷却によって増加することが分かった。しかし、乱れの発達している下流域では加熱 によって摩擦抵抗が増加する傾向が見られた。凹面上では、平面上の流れと違って冷却によっ て流れが安定化するとは言えないため、今後より詳細な解析が必要である。

Fig. 4 Energy spectrum.



Fig. 5 流れ方向に関する摩擦抵抗分布、(左)平面(右)凹面

2.4 長波長不安定性によるらせん渦の不安定化過程の解明

本研究では擾乱を加える前の準定常状態であるらせん渦(基本流)を作成し、基本流に線形の擾乱 を加える。時間発展で得られる結果から擾乱の不安定モードと解析・特定する。その後基本流に 有限振幅を持つ線形擾乱の不安定モードを加え時間発展を行った。用いた計算手法は直接数値シ ミュレーション(DNS)である。

Fig. 6 左図に非線形時間発展で得られた擾乱エネルギーの時間変化、右図に時刻 t=31.75 でら せん中心での渦度分布を回転させた図を示す。左図については、擾乱エネルギーは線形擾乱を加 えると通常指数関数的な成長が起こるが、有限振幅の場合特定時刻においてエネルギーの成長が 停止し、下降が始まる。それによりらせん渦は周期的な安定性を失う。この時間発展を行う前は 2 周分のらせん渦であったが、片方の1 周らせんがもう一方のらせんへ入り込む移動が起こり、 らせん位置の入れ替わりが起こった。さらに時間発展させると右図のようにらせん同士が接近し、 切りつなぎと呼ばれる現象が起こった。この現象により接近面で打ち消し合いが起こり、打ち消 し合いの端でそれぞれの渦が繋がる。この過程により元々2 周存在したらせん渦は時間発展によ り 2 つの渦に分離し、輪の形状となる渦輪とらせん間隔が 2 倍に伸びた 1 周のらせん渦が出現し た。切りつなぎはらせん渦の数値計算においては過去の研究においては得られなかった現象であ る。過去の研究ではらせん対称性を仮定していたため、らせんの入れ替わり、崩壊などの現象を 調べることができていなかったが、本研究は対称性の仮定していないため、3 次元的な分布の変 化を見ることで新たな現象を解明することができた。





Fig.6 (左) 非線形時間発展におけるエネルギー変化、(右) らせん中心渦度分布の3次元可視化

3. 研究目標の達成状況

進捗状況は順調であり、予定の計画にしたがって成果を挙げている。

4. まとめと今後の課題

機械学習による乱流モデリングの研究においては、CNN による壁面応力の予測に成功した。 これにより、壁面モデル LES の精度を向上させることができる。その検証が今後の課題の一つ である。また、2 次元乱流の SGS 応力の予測をニューラルネットワークにより行い、実際にニ ューラルネットワークモデルを用いる LES が精度よく行えることを示した。

平面/凹面上における圧縮性乱流境界層の壁面温度による制御に関する研究においては、壁面 温度の値によって乱流遷移の位置が変化し、その結果摩擦係数分布が変化することを確認した。 超音速流における検証が今後の課題である。さらに、長波長不安定性によるらせん渦の不安定 化過程の解明においては、らせん渦の一部が切りつなぎを起こすことでらせんのピッチが変化 する現象を発見した。この過程が平均流れに及ぼす影響の解明が今後の課題である。

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Golsa Tabe Jamaat and Yuji Hattori, "A priori assessment of wall modeling in large eddy simulation using a nonlocal data-driven approach," submitted to Phys. Fluids.

著書

国際学会

G. Tabe Jamaat, Y. Hattori, "Searching for a Wall Model in LES using a Data-Driven Approach," Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, 2022.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, Yuji Hattori, "Stable a posteriori LES of forced two-dimensional turbulence using shallow artificial neural networks," 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2022.

Golsa Tabe Jamaat, Yuji Hattori, "A data-driven approach using CNN for wall modeling in Large Eddy Simulation," 75th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, 2022.

国内学会・研究会等

Golsa Tabe Jamaat, 服部裕司, LES におけるチャネル乱流のデータ駆動壁面モデル, 日本 流体力学会年会 2022.

Aditya Sai Pranith Ayapilla, 服部裕司,人工ニューラルネットワークを使用した強制2次元 乱流における LES のアプリオリ分析とアポステリオリ分析,日本流体力学会年会2022. 小澤郁真,服部裕司,平面/凹面上における圧縮性乱流境界層の直接数値シミュレーション, 日本流体力学会年会 2022.

平野 晃大,服部裕司,らせん渦の長波長不安定性のDNSによる線形・非線形解析,第36回数値流体力学シンポジウム,2022.

小澤 郁真,服部裕司,平面/凹面上における圧縮性乱流境界層の壁面温度による制御,第 36 回数値流体力学シンポジウム,2022

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR08APR22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年3月2日提出

固体電解質/コート材界面の Li イオン輸送に関する分子論的解析

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標
- 1.1 研究の背景と目的

次世代全固体 Li イオン電池セルの開発において、固体電解質、活物質、及びその界面での Li イオン輸送特性は非常に重要な研究テーマである。更なるエネルギー密度、入出力、耐久 性など性能向上に向け、Li イオン電池セル内部抵抗について解明は重要な課題。全固体電池 特有であり、実験的に計測が困難な物性値を推定するため、計算シミュレーション解析の活 用し、その特性を理解することにより、高 Li イオン伝導性を有する固体電解質の選定指針を 得ることができる。

1.2 研究期間内の最終目標

全固体 Li イオン電池の特徴を反映したシミュレーションモデルを構築し、固体電解質内部及 び界面での Li イオン伝導特性の評価。

- 2. 研究成果の内容
 - 2.1 固体電解質内Liイオン拡散特性評価

固体電解質 Nueral Network Potential (NNP) モデルを改善し、分子動力学(MD) シミュ レーション計算における温度や結晶内 S と Cl 位置交換が Li イオンの輸送特性への影響を解 析する。

2.2 固体電解質・コート材界面計算系とシミュレータ構築

固体電解質、コート材の結晶構造と格子係数からマッチングする表面ミラー指数を選定し、 界面構造を構築する。同計算系を用いて、量子化学計算で構造安定性の検証や、界面構造に 対応する NNP モデルを作成する。 3. 研究目標の達成状況

固体電解質 Li₆PS₅Cl 結晶内の S と Cl 交換パターンや原子間電荷相互作用を考慮し、機械学習 手法で NNP を再作成した。MD シミュレーション計算を実行する際に結晶構造が崩れる問 題を改善し、S/Cl 交換と温度が固体電解質内部 Li イオンの拡散係数について影響を検証し た。MD 計算と MSD 解析結果より、固体電解質内 Li イオン「ケージ」の存在を証明し、 S/Cl 交換より Li イオン拡散係数が大幅に増加する現象を確認した。

固体電解質とコート材 LiNbO3の界面構造について、参考文献やデータベース資料の調査を行った。結晶構造と格子係数のマッチングを判断し、固体電解質 Li₆PS₅Cl(110)とコート材 LiNbO3(100)表面構造を選定した。Liイオンの拡散を想定し、固体電解質 S/Cl 交換率 50%、 コート材内の Liイオンが界面付近に 20%の欠陥を設定した。構築した界面計算系を用いて 量子化学計算を実行した結果、界面形成エネルギーは約 13.5 meV/Å²である。同構造で界面構 造対応する NNP を作成し、大規模 MD シミュレーション計算で Liイオン拡散より分布の変化、 界面構造の再構築など実現象の再現を期待できる。

4. まとめと今後の課題

固体電解質結晶内の Li イオン輸送現象について検証を行い、計算結果は先行研究の実験結果 や量子化学 MD 計算の結果とよく一致した。今後はより細かい計算条件での検証や、結晶構 造欠陥の影響について計算を検討する予定。固体電解質・コート材界面 NNP モデルを用いて、 大規模計算系で界面構造の安定性と Li イオン輸送現象の検証を行う予定。外部電場の影響につ いて、NNP モデルに応用する解析手法も検討中。

5. 研究成果リスト

5.1 学術論文·学会発表

学術雑誌(解説等を含む)

なし

著書

なし

国際学会

なし

国内学会・研究会等

黄聖峰,馬渕拓哉,安田博文,幸琢寛,徳増崇:「固体電解質 Li6PS5Cl 内部の Liイオン輸送特性に関する分子動力学解析」,日本機械学会 M&M 2022 材料力学カンファレンス,2022 年9月 26日~28日

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01MAY22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.4 \sim 2024.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月3日提出

相変態をともなう鉄内部の電場による炭素拡散に関する分子論的解析

徳増 崇 東北大学流体科学研究所 教授

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

鉄鋼は何世紀にもわたって広く使用されてきた構造材料であり、現在でも機械的特性を向上 させるために研究が続けられている。特に、熱による炭素拡散は古くから研究が行われてき た。しかし現在処理に必要となるエネルギーが少ないなどの利点から注目されている放電プ ラズマ焼結法では、電場も炭素拡散に強く影響していることが考えられている。加えて鉄鋼 の構造は、炭素濃度に強く依存することが知られているため、所望の鉄鋼構造や機械的性質 を得るためには、熱だけでなく電場による拡散現象を解析することが大変重要である。一方 で、電場による鉄鋼中の炭素原子の拡散現象のメカニズムを物理的に説明する知見は乏しい。 北らによる先行研究では原子間ポテンシャルとして、EAM ポテンシャル (embedded atom method)を使用している。しかしこの計算系における鉄鋼の相変態温度が実験値より低いた めに、炭素拡散の温度依存性を定量的に評価することが困難となっていた[1]。そこで本研究 ではこの問題を克服するために、従来の EAM ポテンシャルの代わりに、Nguyen らが開発 した ABO ポテンシャル(analytic bond order potential)[2]を用いた。このポテンシャルの妥 当性を検証することで、鉄鋼中の炭素拡散の電場依存性を解析するために必要となる基礎的 な知見を得ることを目的とした。具体的には、炭素原子の平均二乗変位から拡散係数と拡散 に要するエネルギーを算出し、ポテンシャルの妥当性の検証を行うことを目標とする。

[1] 北快理,馬渕拓哉, Patrice Chantrenne,徳増崇,電場下における金属結晶内部の炭素 拡散に関する分子論的解析,日本機械学会 2021 年度年次大会講演論文集, 2021.

[2] Tien Quang Nguyen, Kazunori Sato, Yoji Shibutani, Development of Fe-C interatomic potential for carbon impurities in α-iron, Computational Materials Science 150 (2018) 510-516.

1.2 研究期間内の最終目標

原子間ポテンシャルを計算系に導入し、その妥当性の検証を行う。検証後、相変態を考慮し

た系における、炭素拡散の電場依存性と温度依存性の解析を行う。

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
- 解析を行うにあたり、まずエネルギー保存則を満たすタイムステップを決定した。NVE アンサ ンブルにて系の全エネルギーを計算し、タイムステップは 0.1 fs が適切であることが分かった。 次に原子間ポテンシャルが計算系に適切に導入されていることを確認するために、溶解エネル ギーを計算し、先行研究の値[2]と比較した。計算結果から、炭素原子 1 つを八面体空隙に配置 した場合の溶解エネルギーは、0.745[eV]であった。この値は、先行研究の値(0.844[eV])と 比較的よく一致した。しかし炭素原子を 2 つ配置した場合、1.681[eV]であり、先行研究の値 (2.241[eV])と大きく異なった。最後に、鉄鋼中の炭素原子の拡散係数と拡散に要するエネル ギーバリアの値を得るために、平均二乗変位を計算した。計算結果から拡散に必要なエネルギ ーの値は、0.359[eV]であることがわかった。この値は、DFT 計算の結果(0.86[eV])と比較し て非常に小さい値である[2]。
- 3. 研究目標の達成状況

溶解エネルギーの計算を行うことで、ABO ポテンシャルが計算系に適切に導入されているかを 確認した。炭素原子1つを八面体空隙に配置した場合の溶解エネルギーは、先行研究の値と比 較的よく一致した。一方で炭素原子を2つ配置した場合、先行研究の値と大きく異なったため、 以降の解析では、炭素原子を1つ配置した場合のみについて解析を行った。平均二乗変位の計 算結果から拡散係数と拡散に要するエネルギーの値を算出し、ABO ポテンシャルの妥当性の検 証を行った。計算結果から今回使用した計算系では、拡散現象を適切に表現できないことが分 かった。

4. まとめと今後の課題

本研究では、鉄鋼の相変態温度を適切に表現できる原子間ポテンシャルとして、ABO ポテンシャルを導入した。しかしこのポテンシャルは拡散現象を過剰に表現してしまうことがわかった。 その原因として、ポテンシャルのパラメータフィッティング過程において緩和計算が実施され ていないことが考えられる。今後、新たに適切な原子間ポテンシャルを調査し、その妥当性を 検証する予定である。その後、相変態を考慮した系における、炭素拡散の電場依存性と温度依 存性の解析を行う。

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

特になし

著書

特になし

国際学会

Ryuta Onozuka, Takuya Mabuchi, Patrice Chantrenne, Takashi Tokumasu: CarboEDiffSim :Molecular Theory Analysis of Carbon Diffusion in Iron which is Happened Phase Transformation under Electric Field, ELyT Workshop 2022 2022 年 11 月 17 日 TOHOKU UNIVERSITY The Université de Lyon.

国内学会・研究会等

特になし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 特になし

書式 (1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	GR01JUN22
研究種別	一般研究
利用期間	$2022.06 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年03月02日提出

固体高分子形燃料電池長寿命化に向けたセリウムイオン輸送モデルの

構築とセリウムイオン分布シミュレータの開発

鈴木 寛人

東北大学大学院工学研究科 博士課程前期1年

徳増 崇

東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

本研究では自動車や家庭用燃料電池に使われる固体高分子形燃料電池 (Polymer Electrolyte Fuel Cell: PEFC) について取り扱う.現在 PEFC の実用化のためには、主として耐久性お よび低コスト化の2つの課題がある.このうち耐久性の目標値として40,000h以上が要求さ れている.しかし、現在の耐久性は 10,000 h 程度であるため、劣化の原因究明とその対策 が急務となっている。劣化の原因の1つとして高分子膜の化学的劣化が挙げられている。副 生された過酸化水素が鉄イオンなどの不純物と接触すると、ヒドロキシラジカルが発生し、 高分子膜を攻撃し分解するという一連のメカニズムが考えられている.この分解を抑制する ためにヒドロキシラジカルを不活性にする物質(ラジカル捕捉材)を高分子膜内に添加する 研究が進められ、実用化されている.ラジカル捕捉材として最も有用な物質の一つがセリウ ムイオン (Ce イオン) である. しかし、電解質膜中でセリウムイオンは移動し分布が不均一 になる現象が報告されており、濃度が薄い場所ではラジカル捕捉材としての効果が薄くなり 劣化が進行してしまう.また、ラジカル捕捉材の加えすぎにより電解質膜のプロトン輸送が 妨げられ、PEFCの出力能力が低下するという問題もある.そのため、電解質膜内部でのCe イオン輸送メカニズムを理解することは燃料電池としての性能を維持しつつ、Ce イオンの移 動を制御し電解質膜の耐久性を向上させるために重要である.しかし、実際に40.000hにも わたる稼働実験のコストは膨大であり、また、ナノ構造を有した電解質膜内部で生じる現象 について実験による解析は難しいことからシミュレーションによる解析が求められている.

1.2 研究期間内の最終目標

電解質膜中での Ce イオンの流束は Nernst-Planck の式と水の対流による影響を考慮して次 式のように定義できる.

 $J_{ce} = \mathrm{K_c} W_m C_{ce} - D_{ce} \nabla C_{ce} - u_{ce} z_{ce} C_{ce} \mathrm{FV} \varphi$

ここで、第一項は水の対流による Ce イオンの流束を示す. K_cは水の流速に対する Ce イオン の流束、 W_m は水の流速、 C_{ce} は Ce イオンの濃度である.また、第二項は Ce イオンの自己拡 散を示す. D_{ce} は Ce イオンの拡散係数である.第三項は電気泳動を示す. u_{ce} は Ce イオンの 泳動速度、 z_{ce} は Ce イオンの電荷、Fはファラデー定数、 φ は電位である.しかし、 K_{c} , D_{ce} , u_{ce} の 値は解明されていない.そこで本研究では PEFC の電解質膜内に Ce イオンを添加した系を 考え、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 法を用いて CFD シミュレーションへの応用 を目標とした Ce イオンの輸送特性 (K_{ce}, D_{cee}, u_{ce})を明らかにする.

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください) 高分子電解質膜内部の Ce イオン輸送現象について, 膜内の水の対流及び電位勾配を想定した 計算系を作成し, 分子分布及び輸送特性を解析した. その結果, 特定の含水率以下では含水率 の増加に伴い親水基と Ce イオン間の電気的相互作用の低下と膜内の水クラスター接続性向上 によって水の対流及び電位勾配による Ce イオン移動度が増加することが明らかとなった.
- 3. 研究目標の達成状況

高分子電解質膜内部における Ce イオン輸送現象の温度依存性について解析し,親水基・セリウムイオン周りの水和構造及び水クラスター接続性の変化により輸送現象が大きく変化することが明らかとなった. さらに,温度・濃度についても輸送に関する特性は得られたがその原因については調査中である.

4. まとめと今後の課題

本研究では、高分子電解質膜内部におけるセリウムイオン輸送現象について解析を行った.今後の課題として、マクロスケールのセリウムイオン分布シミュレータに本研究で得られたセリウムイオン輸送特性を適用することでセリウムイオンの電解質膜中での分布をより正確に得ることが可能になると考える。さらに、電解質膜内部だけでなく触媒層中での輸送特性も解明することによって産業的にも利用が可能な設計指針を立てられると考えている.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Hiroto Suzuki, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Molecular Dynamics Simulations of Cerium Ion Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Membranes of Polymer Electrolyte Fuel Cells, ECS Transactions, Vol. 109 (2022), pp. 295-302.

著書

なし

国際学会

Hiroto Suzuki, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Molecular Dynamics Simulations of Cerium Ion Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Membranes of Polymer Electrolyte Fuel Cells, 242nd ECS meeting, (2022).

Hiroto Suzuki, Takuya Mabuchi and Takashi Tokumasu: Analysis of Cerium Ion Transport Properties in PEM of Polymer Electrolyte Fuel Cells Using Molecular Dynamics Simulations, 27th EFCF, (2023).

国内学会・研究会等

鈴木寛人,馬渕拓哉,徳増崇:MD シミュレーションを用いた固体高分子形燃料電池高分子 膜内部における Ce イオン移動現象の解析,第 29 回燃料電池シンポジウム,(2022). 鈴木寛人,馬渕拓哉,徳増崇:分子動力学シミュレーションを用いた固体高分子形燃料電池 触媒層中のセリウムイオン輸送現象の解析,第 60 回日本伝熱シンポジウム,(2023)

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

I.研究成果概要

若手研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	YG01APR21
研究種別	若手研究
利用期間	$2021.04 \sim 2023.03$
報告回数	第 2 回報告

2023年07月20日提出

ガスジェット浮遊法による溶融体の物性計測高度化に向けた

マルチフィジックスデータ同化解析

阿部 圭晃 東北大学流体科学研究所 助教

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

溶融体(1000℃以上の溶融した金属やセラミック等)の熱物性(粘性,表面張力等)は,鋳造・結晶成長・溶接・3Dプリンティング等の様々な高温プロセスの支配因子であり,航空宇宙分野の機能性材料開発への適用も含め,高精度な測定技術が求められる.しかし,溶融体は高温かつ高反応性を有するため容器に格納した状態での測定が難しく,銅等の基礎材料ですら熱物性データは正確に整備されていない.そこで希ガスの噴流(以下ガスジェットと呼ぶ)により溶融体を浮遊させ,その振動特性から熱物性を算出するガスジェット浮遊法(下図に概要を示す)が提案されている[1].近年では特に,大型放射光施設(SPring8)において溶融金属ガラスの回折特性計測に用いられる等,無容器測定法としての有用性が注目を集めている[2].



しかし,溶融体をガスジェットで安定に浮遊させるためガス流量を試行錯誤的に調整する必要があり,また溶融体の変形が物性測定の精度に及ぼす影響が検証されていないという問題 点から,実験測定の確実性・信頼性は未だ十分でない.これには,ガスジェット浮遊法を適
用して実際に物性を測定することに重きが置かれ、浮遊法そのものの物理現象が十分に議論

されてこなかったという背景がある.そこで本研究では、実験観測が困難な1000℃超の溶融

体周りのガスジェット流れや溶融体内部流動を数値解析により再現し、実験計測で取得可能

な溶融体の振動特性(減衰率)に基づく実験と計測のデータ同化を試みる.

1.2 研究期間内の最終目標

本研究では、1000℃以上に加熱された溶融体をガスジェットにより浮遊させることで熱物性 計測を行うガスジェット浮遊法の高度化(浮遊安定化による計測確実性の向上・溶融体変形 評価による測定誤差の低減)を最終目的とし、そのためにマルチフィジックス数値解析(溶 融体の浮遊運動・溶融体周りのガスジェット流れ・溶融体内部流動の連成数値解析)と実験 のデータ同化を試みる.本研究では、ガスジェット浮遊法の高度化に向けて、以下の2つを 明らかにする.

【A:溶融体のガスジェット浮遊が安定化する流体力学的機構】

実験では溶融体の温度により浮遊の安定性に影響があることが指摘されているものの,どの ような条件で安定化するのか,またその物理的なメカニズムは明らかになっていない.本研 究ではまず溶融体の位置を固定した準定常解析からスタートし,ノズル直上を中心に位置を 変化させたパラメトリック解析を行う(A-1:剛体球を仮定した溶融体の静安定性解析).こ れにより,溶融体に働く流体力が復元方向(ノズル直上に戻す力)かどうかを求めて静安定 性の温度依存性を調べることで,安定浮遊の条件を見出す.また加熱を有する圧縮性流れの 理論(Rayleigh 流れ)に基づき,復元力が生み出される流体力学的機構を明らかにする.以 上の静安定性の議論に続いて,溶融体の運動方程式と流体解析を連成させた運動連成解析を 実施し,動的な安定性が実現される条件を見出す.先の静安定解析で得られた安定化機構が 動安定時においても適用されるかを検証することで,溶融体の浮遊安定化機構の解明を試み る.なおこの段階では,剛体球を仮定した非変形の溶融体に対して浮遊運動連成解析を行う (A-2:剛体球を仮定した溶融体の動安定性解析).

【B:溶融体の形状変形による物性値の測定精度への影響】

実験では溶融体は変形しながら浮遊し、物性値の計測はその変形が球面調和関数に従うもの と仮定して表面張力や粘性係数が算出される.しかし、ガスジェットから受ける流体力によ り実際には非球状となることが予想され、球面調和関数では近似出来ず物性値算出の精度低 下に繋がることが近年指摘されている.本項目では、先の剛体球運動モデルにより得られた 流体力を元に、溶融体の変形解析を行うことで物性値を算出し、球面調和関数を仮定した場 合に算出される物性値との差を明らかにする(B-1:溶融体の変形を予測する粒子法解析の試 行計算).これにより、溶融体の変形がどの程度物性値の推定誤差に影響するかを評価するこ とが出来る.また、最終的には溶融体の変形解析と、項目Aの浮遊体運動解析を連成(B-2: 完全分離解法を用いた連成解析手法の検証、B-3:溶融体変形と溶融体浮遊運動の連成解析) させたマルチフィジックス連成解析の枠組みを構築し、実験に近い状態で物性値の算出が行 えるようにすることで、実験と解析のデータ同化実施へと繋げる(B-4:溶融体の変形運動連

成解析と実験データの融合解析).

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 剛体球を仮定した溶融体の安定性解析

まず,項目Aに関連し,圧縮性 Navier-Stokes 方程式を物体適合・構造格子を用いて離散化 し、2次元層流計算,3次元LESによる浮遊安定性解析を行なった.計算ソルバーは宇宙科学 研究所・宇宙研究開発機構にて申請者も開発に携わったLANS3Dを用いた.対称保存型メトリ ックによる保存量保存性を担保した格子の移動変形と,領域分割によるMPI並列による解析を 行なった.始めに,項目A-1として溶融体は変形しない剛体円柱と仮定し,またノズル直上付 近で位置を変化させたパラメトリック解析を行った.流体解析は2次元解析とし,準定常状態 における流体力を算出することで,溶融体の位置変化に対する静的流体力の変化をマップ化し た.これにより,高温溶融時には壁面付近で反発力が生じる一方で,常温時には反発力が発生 せず,不安定となりうることを示した.

次に,項目 A-2 として A-1 で得た知見を元に,常温・高温球の 2 次元, 3 次元浮遊安定解析 を行なった.ここでは流体場と球の運動連成解析を行い, A-1 で判明した高温時の反発力が実 際の浮遊安定化にも寄与することを示した.このことは実験で観測される常温時の不安定性・ 高温時の安定性と一致する傾向であり,定性的ではあるが数値解析によって実験現象が再現さ れたと言える.ここまでの成果を発表し,第54回流体力学講演会において流体力学部門最優秀 賞を受賞した.

2.2 溶融体の変形を予測する粒子法解析

次に,項目 A-1,2 で得られた溶融体にはたらく流体力を用いて,B-1 として溶融体の変形解 析を行なった.手法としては,弱圧縮性の SPH (WSPH)を用いた粒子法に基づく変形解析で あり,共同研究者の石原真吾助教の協力により,浮遊時の変形形状の予測とそれに伴う表面張 力係数の推定(従来は球面調和関数のみを仮定)を補正する式が導出された.本成果を元に, 「浮遊液滴の表面張力推定方法および浮遊液滴の表面張力推定装置」として特許出願を行なっ た.また,以上の成果を元に科研費に応募し,挑戦的研究(萌芽)として R4 年度より採択さ れている.

2.3 完全分離解法を用いた連成解析手法の確立

溶融体の変形と流れの連成解析 B に向け,高効率の連成解析手法(完全分離解法)の確立に 向けた研究開発を行った. SPH 法による変形解析と流体解析の連成における解析手法の高効率 化が期待出来るため,様々な流体構造連成ベンチマーク問題に対して適用を行なった.完全分 離解法は従来の逐次反復による平衡解予測と異なり,複数の変形解候補に対して残差力を最小 とする変形を並列解析により求める手法である. 複合材航空機主翼の変形解析を例題として本 解析に取り組み,国内学術誌に掲載される成果(学術誌 1)を得た.

以上の内容は、研究概要の図1の各欄に対応している.



3. 研究目標の達成状況

本研究において, A-1 と A-2 の剛体球解析はおおむね目標を達成し, B-1 の変形解析も実施し た.いずれも学会講演賞や特許出願, 科研費(挑戦的研究(萌芽))獲得に繋がる成果となった. 以上の成果を元に, 現在関連論文を執筆中である.また溶融体変形を考慮した連成解析に向け 考案した新しい流体構造連成解析手法である完全分離解法は,国内誌であるが,速報として掲 載された.一方,溶融体変形を考慮したデータ同化解析までは至らず,今後の課題としてまと めたい.以上のことから,当初の研究目標が完全に達成されたとは言えないが,研究過程で新 たな連成解析手法の提案に結びつく等,予期しない成果を生み,十分な研究が行えたと考える.

4. まとめと今後の課題

これまでに剛体球による2次元・3次元浮遊解析を達成し,実際の実験で確認される現象(常 温時には不安定だが,高温溶融時には安定化する)を数値計算においても再現することが出来 た.このことから,未だ変形の効果等,考慮出来ていない物理現象はあるものの,溶融体の浮 遊に関する基礎的な現象理解,数値解析コードの構築に至った.一方,予期せぬ成果として, 新しい高効率な連成解析手法(完全分離解法)の考案に繋がった.今後の課題としては,・B-3: 溶融体変形と溶融体浮遊運動の連成解析,及び B-4:溶融体の変形運動連成解析と実験データ の融合解析を行うことを課題と考えたい.具体的には,振動減衰率を観測量として実験と数値 解析の同化が行われるようアンサンブルカルマンフィルターに基づく解析が考えられる.これ により,実験では計測できない溶融体形状を数値解析結果から得ることが可能となり,変形が 球面調和関数であると仮定して算出した場合の物性値(粘性係数・表面張力)がどの程度の誤 差を含むかを定量的に評価可能となると期待出来る.

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

 阿部 圭晃,山崎 智基,伊達 周吾,竹内 稔,庄司 伊織,大林 茂,岡部 朋永「複合材航 空機主翼の静的空力弾性解析に向けた完全分離解法の提案」日本複合材料学会誌,48,6(2022), 246-257

著書

なし

国際学会

1. Yoshiaki Abe, Masayoshi Adachi, Shingo Ishihara, "Effects of surface temperature on stability of aerodynamic levitation technique" The 13th Asian Thermophysical Properties Conference, ATPC2022 September 26-30, 2022, Online

国内学会・研究会等

- 阿部 圭晃,小西 貴之,安達 正芳,石原 真吾,岡部 朋永:ガスジェット浮遊法における 高温球の浮遊安定性,第 53 回流体力学講演会/第 39 回航空宇宙数値シミュレーション 技術シンポジウム,2021年6月30日~7月2日,オンライン開催.
- 阿部 圭晃,石原 真吾,安達 正芳 高温高反応性溶融金属の熱物性測定に向けたガス 浮遊法の数値解析,日本機械学会 第 100 期流体工学部門講演会,2022 年 11 月 13 日 熊本大学
- (招待講演)阿部 圭晃・高温高反応性溶融金属の熱物性測定に向けたガス浮遊法の数値 解析・第9回東北大学若手アンサンブルワークショップ 2022 年 11 月 22 日
- 4. (招待講演)阿部 圭晃・流体構造連成解析に基づく複合材航空機の最適設計・日本機械
 学会計算力学部門 解析・設計の代替モデリング研究会 第6回研究会 2022 年 12 月 22
 日

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

- 2021年8月3日,流体力学部門最優秀賞,「ガスジェット浮遊法における高温球の浮遊 安定性」,第53回流体力学講演会/第39回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジ ウム(一般社団法人)日本航空宇宙学会/国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構)
- 2. 2021 年 11 月 17 日,若手アンサンブルワークショップ・ポスター賞,「ガスジェット浮 遊法による熱物性測定技術の高度化」阿部圭晃・安達正芳・石原真吾
- 3. 特願 2022-027953, 2022 年 2 月 25 日出願(発明者:石原真吾・阿部圭晃・安達正芳・ 加納純也)
- 令和4年度科研費・挑戦的研究(萌芽)「計算計測融合アプローチに基づく高温高反応性 溶融体の熱物性測定の新展開」(代表:阿部 圭晃)
- 5. 2022 年 11 月 22 日山﨑 智基, 第 9 回東北大学若手アンサンブルワークショップ優秀講 演賞,「航空機主翼の効率的な静的空力弾性解析を実現する完全分離解法」

I.研究成果概要

連携研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	EF01SEP22
研究種別	連携研究
利用期間	$2022.09 \sim 2023.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月27日提出

表面形状、加飾による空力向上の数値計算による検討

焼野 藍子

東北大学流体科学研究所 助教

濵田 真伍,森 悠二 東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻

青山 俊介

豊田合成株式会社

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

従来鮫肌などリブレット形状により摩擦低減されることが知られているが,流れ方向に対し ロバスト性が少なく複雑面上への施工は一般に困難,JAXA で開発中の UV 照射による成形 法は,野外の紫外線の影響により劣化が激しく,維持費用が膨大になることから,これまで 実用化されていなかった.しかし近年,フィルム表面加工やコーティング技術などの発達に より様々な技術の実用化へ見通しがたち,世界で開発にしのぎを削っている.本研究ではそ のような既存技術を凌駕する,実用可能性を考慮した低抵抗化デバイスを提案する.

1.2 研究期間内の最終目標

2022 年度は上記目的を達成するため、対象とすべき部品とアプローチの検討と選定,2023 年度以降の連携検討,目標設定を行う.

- 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください) まずは、車体周り実レイノルズ数での流れの様子を大まかに把握する計算を実施、その後、 ハンプ形状と円柱周りのそれぞれに対して、より解像度をあげた新提案デバイスの剥離抑制 効果に関する性能実証をおこなった。
- 3. 研究目標の達成状況

ハンプ形状並びに円柱に開発したデバイスを設置することにより、乱流遷移が促進し、剥離

領域が短くなることを確認した.デバイスは意匠を変化させない十分小さい高さであり,効 果を与えることを確認した.

4. まとめと今後の課題

今後は、車体にデバイスを搭載した場合の性能評価を行なっていく.

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)
 発表予定なし
 - 5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 2022 年 7 月, <u>Aiko Yakeno</u>, 米国仮出願 63/389,369 ULTRA-FINE ROUGHNESS EFFECT ON TRANSITION DELAY USING DIRECT NUMERICAL SIMULATION

I.研究成果概要

特定研究

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01APR21
研究種別	特定研究
利用期間	$2021.4 \sim 2023.3$
報告回数	第 2 回報告

2023年7月3日提出

流れ中の微生物挙動の予測と制御

石川 拓司 東北大学大学院医工学研究科 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

微生物は、周囲流体の流れや重力、浸透圧といった力学環境によって、個々の細胞および 集団として発現する生体機能が変化することが近年明らかになりつつある。例えば海洋中で は、海水の流れと微生物の遊泳が干渉することで、水面下数メートルの深さに微生物が高密 度に濃縮され、赤潮などを引き起こす。こうした流れ中の微生物の分布や機能を正確に予測 し、効率的に制御する技術は、微生物研究の要であるが、従来の経験則に基づく手法では限 界があった。本研究では、物理法則に裏打ちされた数理モデルを丹念に積み上げ、高度な数 値解析手法を用いることで、流れ中の微生物挙動を予測し制御することを目指す。

1.2 研究期間内の最終目標

まず始めに、微生物の流体力学的な干渉現象を正確に記述できる新規の数値解析手法を開 発する。ストークス流れの数値解析手法である境界要素法と、潤滑流れの解析に用いられる 潤滑理論を融合させることで、任意物体の近距離相互作用を正確に、かつ効率的に扱う数値 解析手法を提案する。次に、微生物集団をアクティブ流体と見なし、その流体力学的性質を 世界に先駆けて解明する。物理刺激によって微生物集団がジョット流となる系を考え、ジェ ットの不安定性からアクティブ流体の表面張力などを明らかにする。

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - 2.1 LTBEM の開発

微生物懸濁液のレオロジーおよび拡散特性は、粒子間の近距離相互作用に強く影響される。 潤滑理論(LT)は、潤滑領域に作用する力とトルクの漸近解を求めるために用いられる古典 的な解析手法である。一方、境界要素法(BEM)は、粒子周りのストークス流を正確に計算 するための計算手法である。本研究では、BEMの近距離相互作用の計算精度を飛躍的に向上 させるため、LT と BEM を組み合わせた新しいハイブリッド法(LTBEM)を提案する。この 手法では、潤滑領域内の流れを LT で、外部の流れを BEM で求める。

粒子を剛体球とし、2 球体のせん断運動、回転運動、衝突運動の解析を行い、LTBEM の妥 当性を確認した。その結果の一例を図 1 に示す。この結果から、2 つの近接球体に働く潤滑 力とトルクの漸近的な性質は、LTBEM によって効率的に捉えられることがわかった。特に、 衝突力に対する BEM の計算精度は LTBEM の導入によって劇的に改善された。これは、粒子 の衝突を防ぐために重要なことである。さらに、得られた結果は、一般性を損なうことなく 多数の球の任意運動に拡張できる。また、LTBEM は任意形状の粒子に対応できる利点も持ち 合わせている。



図1 隙間距離 *c* で衝突運動する2球に発生する潤滑力 *F_z*. 青丸は LTBEM (320 mesh), 白丸 は BEM (320 mesh), 白三角は BEM (不等間隔 590 mesh), 赤線は潤滑理論による解析解.

2.2 微生物の2体干渉解析

開発した LTBEM の有効性を確認するため、微生物をモデル化した表面速度を持つ squirmer (図 2(a))の2体干渉を解析した。図 2(b)に示すように、2体の微生物が徐々に近付いて近 接し、しばらく対となって泳いだ後、最終的に互いに離れていく過程を計算した。この条件 下では、2体の微生物は非常に近い距離まで近付くため、通常の BEM では潤滑力を正確に計 算できず、衝突を回避できない。つまり、通常の BEM では2体は衝突し、重なり合ってしま う問題が生じる。こうした困難を避けるため、通常は近距離斥力を人工的に作用させる。こ の人工的な斥力の強さを制御するパラメータ λ を導入し、λ=0.1と100として解析を行った。 斥力を導入することで、通常の BEM においても安定的にシミュレーションを実行できたが、 微生物の遊泳軌跡は斥力の強さによって大きく異なる結果となった。

一方、LTBEM では潤滑力の解析に潤滑理論を用いているため、2体の微生物が非常に近い 距離まで近付いても、潤滑力を正確に求めることができる。これにより、人工的な斥力を導 入しなくても流体力学的な作用のみで2体の衝突を防ぐことができ、正確な遊泳軌跡の導出 が可能となった。



図 2 2体の遊泳微生物モデルの衝突シミュレーション.(a) 表面速度を持つ squirmer モデル
 (b) LTBEM と BEM (人工的な斥力を導入) で計算した遊泳軌跡の違い



2.3 アクティブジェットの解析

図3 微生物集団が作るアクティブ流体ジェットの不安定性 (左) puller swimmer, (中) 初期条件, (右) pusher swimmer

流体ジェットが液滴に分裂する現象は、長い間自然科学者を魅了してきた。ジェットの微 小な摂動は表面張力によって大きくなり、最終的にジェットが液滴に分裂する (Rayleigh-Plateau 不安定性)。この古典的な現象は古くから研究されているが、流体をアクテ ィブ流体に置き換えた場合にどのように変化するかは明らかではない。本研究では、アクテ ィブ流体のジェットの不安定性を調べた。アクティブ流体は、表面接線速度を発生させるこ とで推進するマイクロスイマーの懸濁液によってモデル化した。その結果、アクティブ流体 のジェットは不安定であり、puller と pusher の間で不安定モードが異なることがわかった。 puller からなるアクティブ流体では、ジェットはニュートン流体と同様に液滴に分裂する。一 方、pusher のアクティブ流体では、ジェットは座屈し、波打つような不安定性を示す。これ ら2つの不安定性の物理的メカニズムは、ジェット中の応力場を調べることで説明できる。 パラメトリック研究により、不安定性における流体力学的相互作用の重要性が明らかになっ た。我々の発見は、アクティブ流体の集団的性質の新たな特徴を明らかにし、アクティブマ ターの予測と制御への道を開くものである。

3. 研究目標の達成状況

ストークス流れの数値解析手法である境界要素法と、潤滑流れの解析に用いられる潤滑理 論を融合させることで、任意物体の近距離相互作用を正確に、かつ効率的に扱う数値解析手 法の開発に成功した。開発した手法を微生物の2体干渉問題に適用し、その有効性を確かめ た。この成果は、数値解析分野で最高峰の Journal of Computational Physics 誌に掲載された。 また、微生物集団をアクティブ流体と見なし、その流体力学的性質を世界に先駆けて解明す る研究に取り組んだ。物理刺激によって微生物集団がジョット流となる系を考え、ジェット の不安定性からアクティブ流体の表面張力などを明らかにすることに成功した。この成果は、 流体力学分野で定評のある Physical Review Fluids 誌に掲載された。これらにより、当初の研究 目標を全て達成することができた。

4. まとめと今後の課題

本研究では、物理法則に裏打ちされた数理モデルを丹念に積み上げ、高度な数値解析手法 を用いることで、流れ中の微生物挙動を予測し制御することを目指した。まず始めに、微生 物の流体力学的な干渉現象を正確に記述できる新規の数値解析手法を開発し、ストークス流 れの数値解析手法である境界要素法と、潤滑流れの解析に用いられる潤滑理論を融合させる ことで、任意物体の近距離相互作用を正確に、かつ効率的に扱う数値解析手法を提案した。 次に、微生物集団をアクティブ流体と見なし、その流体力学的性質を世界に先駆けて解明し た。物理刺激によって微生物集団がジョット流となる系を考え、ジェットの不安定性からア クティブ流体の表面張力などを明らかにした。

これらの研究では、背景流れや壁面境界などは考えておらず、非常に単純な環境下での微 生物挙動を扱っていた。しかしながら、実際の微生物はさまざまな物理刺激に晒されており、 複雑環境下を生き抜いている。今後の研究においては、より複雑な物理環境での研究が必要 であろう。現在、我々は次なるプロジェクト「複雑環境下の微生物挙動の予測と制御」に取 り組んでいる。このプロジェクトを推進することでこれらの課題を克服していきたい。 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌

Takuji Ishikawa: Lubrication theory and boundary element hybrid method for calculating hydrodynamic forces between particles in near contact. *Journal of Computational Physics*, (2022), Vol. **452**, 110913.

Takuji Ishikawa, Thanh Nghi Dang, Eric Lauga. Instability of an active fluid jet. *Physical Review Fluids*, (2022), **7**, 013104

国際学会

T. J. Pedley, Takuji Ishikawa, D. R. Brumley: RHEOLOGY OF A CONCENTRATED MONOLAYER OF SPHERICAL SQUIRMERS, Thematic Session on Low-Re-number flows and Suspensions at the ICTAM 2020+1 conference, (2021), FM11.001, 107770.

Takuji Ishikawa: Hydrodynamics of ciliary swimming, Invited Talk, Biofluid Symposium in Biofluids 2021, (2021).

国内学会・研究会等

Takuji Ishikawa: Functions and Efficiency of Ciliary Swimming, Keynote Talk, JSME・KSME ジョイントシンポジウム,日本機械学会 2021 年度年次大会 (2021).

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01APR22
研究種別	特定研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月27日提出

航空宇宙工学に関わる圧縮性流体の高精度数値シミュレーション研究

河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
- 1.1 研究の背景と目的

航空宇宙工学分野における未解決の流体力学的問題の多くは、高レイノルズ数の圧縮性乱 流現象と深く関わっている.特に航空機やロケットエンジン等の実機スケール高レイノルズ 数流れにおける乱流境界層現象に関しては、実験による計測が困難なだけでなく、乱流のモ デル化無しに高忠実な数値流体解析(LES/DNS)を実施することも数十年のスパコンの発達 を考えても不可能である.そのため高レイノルズ数の乱流境界層現象に関する物理現象の理 解およびそこから導かれる物理モデリングは十分に進んでいない.従って本課題では、高レ イノルズ圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減するための数値計算 手法の構築を以下の3つのサブ課題の観点から行う.

(1) 物理モデル: 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング

エネルギー保有渦を適切に解像しない粗格子 LES においては乱流の解像成分が非物理的な 構造になってしまうため、従来の SGS モデルでは適切な乱流物理を再現できないことが知ら れている.そこで本サブ課題では、機械学習によって乱流のスケール間相関の本質的な性質 を学習することで、従来の手法では困難な粗格子条件に対しても適切な SGS スケールの乱流 モデリングを行うことが出来る SGS モデルの構築を行う.

(2) 時間積分法: 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

高レイノルズ数流れでは、主流と最小渦の時間的および空間的スケールの差が非常に大き くなる.このとき、小さい時間スケールの物理に合わせて数値計算の時間刻み幅を小さくす ると、大きな時間スケールの物理に対する解析を行うのに必要なデータを得るまでに膨大な 計算時間を要する.一方で、時間刻み幅を大きくとることが出来る陰解法を用いた場合には、 過度に時間刻み幅が大きくすると正しく流れの時間発展を追うことができない.そこで本サ ブ課題では異なる時間刻み幅を用いて得られた流れ場の相関を機械学習によって学習するこ とで,粗い時間刻み幅であっても流れ場を正しく時間発展させることが出来るデータ駆動型 の流れ場修正手法の構築を行う.

(3) 対流項離散化手法:非構造格子有限体積法に対する安定化かつ非散逸な計算スキーム

我々の研究グループでは構造格子有限差分法および直交格子有限体積法に対して,安定か つ非散逸な対流項数値計算スキーム「KEEP (kinetic energy and entropy preserving) スキ ーム」を構築している. KEEP スキームでは直接解いていない運動エネルギーやエントロピー の保存式も数値的に満足することで数値粘性を用いることなく数値安定性を向上させている. 先行研究により KEEP スキームを用いることで従来の風上スキームと比較して必要となる計 算格子点数を飛躍的に削減出来ることが示されている. 直交格子有限体積法は埋め込み境界 法と組み合わせることで航空機やロケットエンジンなどの複雑形状に対する高忠実な流体解 析を行うことが可能である. 一方で,一般に複雑形状周りの数値流体解析を実施する際には 非構造格子有限体積法が未だ広く用いられている. そこで本サブ課題では,構造格子有限差 分法および直交格子有限体積法に対して構築された既存の KEEP スキームを非構造格子有限 体積法へ拡張する.

1.2 研究期間内の最終目標

本課題では、高レイノルズ圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減 するための数値計算手法の構築を行う.上記3つのサブ課題に対するそれぞれの最終目標は 以下の通りである.

(1) 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング

粗格子を用いた場合にも流体物理を正しく再現することが出来る SGS モデルおよびそのモ デリング手法を提案する.構築した SGS モデルのアプリオリ・アポステリオリテストを行い, 粗格子 LES の SGS モデリングに関する知見を得ることを目指す.また,広範な流れ場(高レ イノルズ数・マッハ数,翼周り流れ場など)に対して提案 SGS モデルのテストを行うことで, 提案モデルの堅牢性の解析を行う.

(2) 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

機械学習による時間刻み幅拡大に向けた流れ場修正法の構築を行う.具体的には,時間刻 み幅の粗い陰解法で計算した流れ場と正しく時間発展させた流れ場を学習モデルに与えるこ とで粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正を行う.

(3) 非構造格子有限体積法に対する安定化かつ非散逸な計算スキーム

先行研究によって構築された KEEP スキームを非構造格子有限体積法へ拡張する.この際, セル接点およびセル中心有限体積法の両手法に対して定式化を試み,エントロピー保存性の 観点からより適切な離散化手法を提案する.また,非粘性 Taylor-Green 渦やチャネル乱流, 球体周りの流れなどの数値実験を実施することにより,提案手法の有用性および既存手法に 対する優位性を示す. 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング

従来の教師あり学習手法では正しい SGS 応力の予測が困難な粗格子 LES (vLES)に対し,教師 なし学習を用いた機械学習パイプラインを構築した.本サブ課題では学習データ及び検証用デ ータに,摩擦レイノルズ数 $Re_{\tau} = 1000$ のチャネル乱流を用いた.学習データの生成には DNS お よび LES 解析を行なった. LES の格子解像度は($\Delta x^{+}, \Delta z^{+}$) \approx (72,36)であり,一般的な LES より も粗いものになっている.

図1に vLES の流れ場を提案機械学習モデルを用いて DNS 品質に超解像した流れ場を示す.元 の vLES データでは細かい渦構造がほとんど解像されていない.また,計算格子により解像され ている成分であっても DNS のものと性質が異なるため、vLES は適切な解析ができていないと言 える.一方で,超解像後の流れ場では DNS の流れ場に見られる細かい渦構造が再現されている. また,乱流の低波数成分においても修正がなされており,ピークの大きさなどが DNS のものと よく一致する.図2に提案機械学習モデルによって超解像された流れ場から抽出した SGS 応力 分布を示す.比較として,従来手法である教師あり学習を用いて超解像した流れ場から抽出し た SGS 応力分布も示している.提案モデルでは参照解とよく一致する SGS 応力が得られている のに対し,従来手法では適切な分布を再現できていないことがわかる.このことから,粗格子 LES の SGS モデリングにおいては,本研究が提案する教師なし学習手法が非常に有効であるこ



図 1: 超解像を施した流れ場の主流方向速度分布 ($y^+ \approx 15$). (左,入力 vLES;中央,超解像 流れ場;右,参照 DNS).



図 2: 超解像流れ場から抽出した SGS 応力.実線,提案教師なし学習手法;破線,従来教師あ り学習手法;丸,参照解.青,主流方向垂直応力;橙,壁面垂直方向垂直応力;緑,スパン方 向垂直応力;赤,せん断応力.

2.2 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正

本サブ課題では、非常に粗い時間刻み幅を用いて得られた流れ場を正しく物理発展している 流れ場へ修正する機械学習モデルの構築を行った. *M* ≈ 1.5, *Re*_τ ≈ 205 のチャネル乱流を学習 対象とし、時間積分には陰解法である ADI-SGS を用いた.時間刻み幅を*dt*⁺ ≈ 2.0および0.4とし、 それぞれ 10 ステップと5 ステップ進めた流れ場を修正対象とした.機械学習モデルはこの「陰 解法で解かれた流れ場」から「同じ初期場から十分小さな時間刻み幅で進めた同時刻の参照解」 への変換を学習する.予測時には粗い時間刻み幅を用いて計算された流れ場を入力とし、修正 流れ場を出力する.

図3は時間刻み幅を $t^+ \approx 2.0$ とした場合の、 $y^+ \approx 15$ における速度分布 (u/a_w) を示している. ここでuと a_w はそれぞれ壁面平行断面の主流速度と壁面音速である. 参照解と比較すると、機械学習モデルを用いることにより修正前では捉えられていなかった細かな乱流構造がよく再現されていることがわかる. 陰解法で計算された流れ場は参照解と比較して流れの発展が遅くなっているが、機械学習モデルによる予測結果はこの時間発展の遅れも適切に修正している. またここには示していないが、陰解法で計算した流れ場では圧力振動が生じていたが、この圧力振動も機械学習モデルを用いることにより参照解に近い流れ場へと修正されている. 図4に速度uと圧力pの主流方向スペクトルを示す. 主流方向スペクトルについても、機械学習モデルは時間発展エラーを含んだ修正前の流れ場をより物理的に正しい流れ場へと修正出来ていることがわかる.



図3:修正前後と参照解の流れ場. 左,陰解法;中央,予測結果;右,参照解.



図 4: 主流方向速度 u と圧力 p の主流方向スペクトル. 左, dt⁺ ≈ 2.0; 右, dt⁺ ≈ 4.0; シンボル, 陽解法(参照解); 破線, 陰解法; 実線, 予測結果. 赤, u; 青, p.

2.3 非構造格子有限体積法に対する安定化かつ非散逸な計算スキーム

先行研究によって構築された KEEP スキームを非構造格子有限体積法へ拡張した.この際,セル接点およびセル中心有限体積法の両手法に対して定式化を行い,セル接点有限体積法を用いて離散化を行うことで非構造格子に対しても KEEP スキームのエントロピー保存性と数値安定性を担保出来ることが示された.

図5および図6にチャネル乱流 ($Re_{\tau} \approx 180$)の数値実験結果を示す.図5は平均速度および レイノルズ応力分布,図6はQ値の等値面を示しており,比較対象として非構造格子有限体積 法に広く用いられている3次精度風上スキームの計算結果も示している.提案スキームは2次 精度であるが数値粘性を用いない非散逸スキームであるため,3次精度風上スキームと比較し てよりDNSの結果に近い平均速度やレイノルズ応力の分布を示していることがわかる.また3 次精度風上スキームを用いた場合には数値粘性の影響により渦が散逸しているが,提案スキー ムは渦を散逸することなく微小な渦構造も捉えていることがわかる.



図 5: 平均速度およびレイノルズ応力分布.

Mach number : 0.02 0.06 0.1 0.14 0.18 0.22 0.26 0.3 0.34 0.38 0.42



(a) KEEP scheme (proposed)

(b) Upwind

図6:Q値の等値面. 色付けはマッハ数.

3. 研究目標の達成状況

本課題では高レイノルズ圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減することを目標に,機械学習モデルおよび数値計算スキームの構築を行なっている.今後これま

でに構築された機械学習モデルや数値計算スキームのさらなる改善や検証を行う必要はある が、本年度の研究目標として掲げた機械学習モデルおよび数値計算スキームの構築は概ね達 成出来ている.

4. まとめと今後の課題

本課題では、高レイノルズ圧縮性流れに対する高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に 低減するための数値計算手法の構築を以下の3つのサブ課題の観点から行った.

- (1) 教師なし学習による粗格子 LES における SGS モデリング
- (2) 粗い時間刻み幅によるエラーを含んだ流れ場の機械学習による修正
- (3) 非構造格子有限体積法に対する安定化かつ非散逸な計算スキーム

1 つ目のサブ課題に関して,既存の機械学習手法では困難な粗格子 LES において SGS モデリ ングを可能とする新たな教師なし機械学習ベースの手法を提案した.機械学習によって得られ た SGS モデルは,粗格子を用いた LES においても参照解とよく一致する SGS 応力を得ること ができた.2 つ目のサブ課題では,粗い時間刻み幅により時間積分エラーを含んだ流れ場を正 しい時間発展解に修正する学習モデルの構築を行った.今後はこれらの提案機械学習モデルを 実際に CFD ソルバーに組み込み,様々な流れ場に対してアポステリオリテストを行うことで, より汎用的かつ堅牢性の高いモデルの構築を目指す.最後に3つ目のサブ課題として非構造格 子有限体積法に対してセル接点ベースの離散化を行うことで安定性と非散逸性を両立させた KEEP スキームの構築を行った.これまでは比較的低いレイノルズ数での数値実験を行なって きたが,今後はより数値計算が不安定になりやすい高レイノルズ数流れにおいても提案スキー ムの有用性の検証を行う.

上記 3 つのサブ課題で構築された機械学習モデルおよび数値計算スキームは,高レイノルズ 圧縮性流体の高忠実数値流体解析の計算コストを抜本的に低減するのに非常に有用なものであ り、上述の通り今後はそれぞれの手法の実用化に向けた検証,必要に応じての手法の改善を行 う予定である.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- Soju Maejima, Kazuki Tanino, and Soshi Kawai, "Unsupervised machine-learningbased sub-grid scale modeling for coarse-grid LES" (in preparation)
- Yuichi Kuya, Wataru Okumura, and Keisuke Sawada, "A kinetic energy and entropy preserving (KEEP) finite volume scheme on unstructured grids for compressible flows", (submitted to Journal of Computational Physics, in 1st revision)

著書

該当なし

国際学会

• Soju Maejima and Soshi Kawai: Unsupervised machine-learning-based sub-grid scale

modeling for coarse-grid LES, 75^{th} Annual Meeting of the APS Division of Fluid

国内学会・研究会等

 前島颯樹,河合宗司:教師なし学習 CycleGAN による粗格子 LES の SGS モデリング, 第 36 回数値流体力学シンポジウム,2022 年 12 月

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

該当なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS02APR22
研究種別	特定研究
利用期間	$2022.4 \sim 2024.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月28日提出

複合材料の破壊に関するマルチスケール数値解析

岡部 朋永,山本 剛,川越 吉晃,谷村 雄紀, CHEN YU 東北大学大学院工学研究科 教授,准教授,助教,B4,M2

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

航空機用構造材料である炭素繊維強化複合材料(CFRP)は炭素繊維と熱硬化性樹脂からな る複合材料であり、比強度・比剛性の高さからその需要は増加の一途にある.一方で、材料選 択から部材スケールの変形・破壊メカニズムまでの統一的な見解が得られているとは言い難い. その大きな理由の一つは、CFRP が分子から部材スケールまでの幅広い時空間スケールにおい てそれぞれに固有な現象を有しており、それらを正確に捉える必要があるためである.そこで、 本研究では量子化学計算(QM)、分子動力学法(MD)、有限要素法(FEM)を接続すること により、熱硬化性樹脂を構成するモノマー同士の化学反応から、複合材料の熱機械特性および 変形・破壊評価までを統一的に再現する時空間階層を横断したマルチスケール破壊解析手法の 開発を行う.化学反応スケールからマクロな変形・破壊までを統一的に扱った研究は、世界的 に見ても成功といえる例は見当たらない.さらに本研究では各スケールでの計算手法を成熟さ せ、精緻かつ大規模に行うことで、従来手法では再現できていなかった高分子材料のメゾ構造 や CFRP・炭素材料系の材料特性同定、マルチスケール性を考慮した変形・破壊特性の解明な どの成果が期待される.

1.2 研究期間内の最終目標

本マルチスケール解析手法の開発によって, CFRP の破壊挙動を原子・分子スケールから マクロな積層板スケールまでを一貫して捉えることが可能になり,複雑かつマルチスケール 性を有する CFRP の破壊メカニズムの解明に大きく寄与することが期待される.本手法で得 られた樹脂および CFRP の破壊特性は実験的に検証され,誤差 10%以内の高精度予測を実現 させる. 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

2.1 分子動力学法(MD)も用いた CFRP 母材樹脂の破壊局面同定手法の構築

量子化学計算と MD を組み合わせた反応硬化 MD を用いて硬化樹脂モデルを作成し, それを 用いて樹脂の破壊局面の同定手法を構築した. FEM を用いた CFRP の破壊解析を実施するた めには樹脂の1軸引張/圧縮強度が必要である.しかし, 一般に古典 MD を用いて1軸引張強度 を計算することは手法上の問題で困難である.さらに MD の時間スケールの問題から,実験に 比べて非常に早い変形速度を用いており,これによる過大評価も問題となっている.ここでは 準静的解析, 1 軸圧縮解析, 3 軸引張解析および理論モデル (Argon theory, Christensen の等 方材破壊モデル)を連携し, MD シミュレーションから変形速度依存性を除いた 1 軸引張/圧縮 強度を同定する方法を提案した.3 樹脂種に対して強度同定を行い,実験から得られた各種強 度と比較した.20%程度の過大評価が見られたものの,樹脂間の大小関係に関しては定性的に 一致した.

2.2 CFRP 積層板の成形時残留変形のマルチスケールモデリング

QM,反応 MD,ミクロ FEM,マクロ FEM を連携し,CFRP 積層板の残留変形を予測する 手法を構築した.QM と反応 MD から樹脂の硬化収縮量と物性を取得し、ミクロ FEM によっ て複合材料の等価物性を取得する.最後にマクロ FEM によって成形時の非対称積層板の残留 変形を予測した.成形実験と比較して、本マルチスケールモデリングは変形量およびサイズ・ 形状・積層構成に応じた変形形状遷移を高精度に再現できた.また、樹脂種に応じた変形特性 の違いをマルチスケールモデリングによって系統的に評価した.さらに、実験的に見られた長 期変形を再現するために、粘弾性構成則の導入を今後試みる.

(前プロジェクト(FS02APR20)からの継続検討項目)

2.3 大規模反応誘起相分離シミュレーションの構築

CFRP では破壊靭性を向上させるために,母材となる熱硬化性樹脂に少量の熱可塑性樹脂を 添加する.熱可塑性樹脂/熱硬化性樹脂混合系では硬化反応に伴う反応誘起相分離が起こる. 本研究では粗視化手法である反応硬化散逸粒子動力学法(DPD)用いて,反応誘起相分離を再 現できるシミュレーションを構築し,大規模系を実施することで,相分離構造の遷移現象を評 価した.

2.4 力学的異方性粘弾性材料の簡易な弾性定数計測手法

本研究では、固体材料の共鳴振動現象に基づく超音波共鳴法を用いることで「力学的異方性 粘弾性材料の簡易な弾性定数計測手法」を開発することを目指している.本手法は一度の振動 実験と解析を組み合わせることで材料の全弾性定数を簡易に測定する手法である.現在、超音 波共鳴法では、粘弾性を考慮した解析を用いることで材料の全弾性定数を精度よく評価するこ とが期待されている.そこで、当研究室では粘弾性を考慮した振動解析アルゴリズムを実装し た均質化法を用いて、代表的な異方性粘弾性材料である一方向炭素繊維強化プラスチック複合 材料の全弾性定数評価に取り組んでいる.

2.5 力学的特性に着目した多層カーボンナノチューブ紡績糸の構造最適化

機械学習支援分子動力学シミュレーション手法を用いることで多層カーボンナノチューブ紡 績糸(MWCNT 紡績糸)の潜在引張強度の解明と実験手法で目指すべき構造パラメータ(本数,層 数,カイラリティー,中空空間寸法,層間架橋結合,ねじり角)の調査を行った.無秩序な構造 パラメータの組合せを紡績糸構造に持つシミュレーションモデルから得られた強度と構造に関 する学習データを基礎データに用いた構造最適を行うことにより,最も高い引張強度が得られ る MWCNT 紡績糸の構造パラメータの組合せが明らかとなった.

3. 研究目標の達成状況

当初の計画通りに進行している.

4. まとめと今後の課題

本プロジェクトにおいて基本的な樹脂の破壊特性の同定方法は確立された.これをより上の 階層へ接続し, CFRP 積層板の破壊まで一貫して解析できるようにツール開発を進める.また, 本手法を多樹脂種系や相分離樹脂系などに拡張し,高機能性樹脂/複合材料開発の指針となる提 案を行なっていきたい.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Yoshiaki Kawagoe, Kenji Kawai, Yuta Kumagai, Keiichi Shirasu, Gota Kikugawa, Tomonaga Okabe, "Multiscale modeling of process-induced residual deformation on carbon-fiber-reinforced plastic laminate from quantum calculation to laminate scale finite-element analysis", Mechanics of Materials, **170**, (2022), 104332-104332

Go Yamamoto, Kazuma Matsui, Shuma Yuki, Ji Won Suk, "Determination of transverse isotropic elastic constants of nacre and constituent tablets based on genetic-algorithm-assisted resonant ultrasound spectroscopy", Results in Materials, **15** (2022), 100312

著書

該当なし

国際学会

Yoshiaki Kawagoe, Kenji Kawai, Yuta Kumagai, Keiichi Shirasu, Gota Kikugawa, Tomonaga Okabe, "Multiscale analysis for prediction of process-induced warpage on asymmetric CFRP laminate", 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics, (2022), 7/31–8/5

Shuma Yuki, Yuto Sakuda, Masayoshi Mizutani, Go Yamamoto, "Determination of anisotropic elastic constants of additively manufactured Ti-6Al-4V alloys based on

genetic-algorithm-assisted resonant ultrasound spectroscopy", International Conference on Materials & Processing 2022, (2022), 11/6–10

国内学会・研究会等

結城秀麻,作田祐人,高野直輝,水谷正義,山本剛,「共振超音波スペクトロスコピー法を用いた金属 3D 積層造形製チタン合金の弾性定数評価」,日本機械学会 M&M2022 材料力学カンファレンス,2022 年 9 月 26 日~28 日

Chen Yu, 國友晃, 山本剛, 「空孔欠陥を有するカーボンナノチューブの機械的特性に及ぼす 層間架橋結合の影響評価」,日本機械学会 M&M2022 材料力学カンファレンス,2022 年 9 月 26 日~28 日

5.2 その他(特許,受賞,マスコミ発表,等) 該当なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS03APR22
研究種別	特定研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年02月28日提出

高強度レーザー照射グラフェンにおける異常イオン加速機構の解明 ハリハラ スダン クマール、大西 直文 東北大学大学院工学研究科 博士課程学生、教授

1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)

1.1 研究の背景と目的

超薄膜グラフェンターゲットからの炭素イオンが,超高強度レーザーとの相互作用により極 めて高いエネルギー(750 MeV 以上)まで加速されることが実験で確認されている.しか し,従来の particle-in-cell (PIC)シミュレーションでは,この異常加速のメカニズムを説 明することができていない.そこで本研究では,分子動力学(MD)と PIC シミュレーショ ンを組み合わせたハイブリッド手法で異常加速のメカニズムを解明することを主目的とする. レーザープリパルスのシミュレーションは MD で行い,ターゲットを PIC 環境にエクスポ ートしてメインパルスのシミュレーションを行う.まずこのハイブリッド手法を検証し,他 の実験条件にも適用しながら異常加速の様子について調査する.

1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内に, MD-PIC ハイブリッド手法を開発し, その検証を行い, 超薄型グラフェンタ ーゲットからの炭素イオンの異常加速のメカニズム解明に応用することが最終目標となる.

2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)

本研究は、共同研究の一環として行われている.実験はフランスのレーザー施設 VULCAN や量子科学技術研究開発機構のレーザー施設 JKAREN などで行われ、報告者らが実験をサ ポートするシミュレーションを行っている.陽子線治療、粒子加速器、重イオン核融合など の応用には、安定した単色の高エネルギーイオンビームの発生が不可欠である.これは世界 中で活発に研究されている分野であり、高エネルギー密度物理学のコミュニティで解決すべ き重要な問題である.

2.1 新しい解析手法の開発

今年度は、ハイブリッドシミュレーション手法を開発し、検証を行った. グラフェンとプレ パルスの相互作用の MD シミュレーションの結果を PIC 環境に取り込み、開発した結合ス キームでメインパルスのシミュレーションを行った.

2.2 新しい現象の解明

新たに開発したハイブリッドシミュレーションを用いて,実験で観測された異常加速を再現 することができた.シミュレーションの結果を精査すると,レーザープリパルスによってグ ラフェン層が圧縮され,レーザースポットサイズ付近の密度が増加していることが判明した. この密度上昇により,メインパルスとの相互作用において,輻射圧加速とシース加速といっ た従来から知られているメカニズムの組み合わせが起こり,非常に高いイオンエネルギーが 得られるという,新しいタイプの粒子加速が発生することが分かった.

3. 研究目標の達成状況

2022-2023 年度に設定した研究目標は達成した.

- MD と PIC シミュレーションを統合するためのハイブリッド手法を開発し,既存の実験 研究をシミュレーションすることで検証した.この方法論は,実験から得られた粒子エ ネルギーをうまく再現することができることがわかった.
- また,異常な加速のメカニズムについても,ハイブリッド手法を用いて説明することに 成功した.
- 4. まとめと今後の課題

MD と PIC のシミュレーションを組み合わせたハイブリッドシミュレーション手法を開発し、検証を行った.また、異常加速のメカニズムについても、ハイブリッドシミュレーション手法を用いて説明した.

今後の課題は、ハイブリッドシミュレーションが必要となるレーザー/ターゲットのパラ メータ空間を探索することである.次年度は、理論とシミュレーションの助けを借りてこの 異常な加速度パラメータ領域を探索し、理論的な予測はシミュレーションを使用して検証さ れることが期待される.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)

5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

Harihara Sudhan Kumar, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, and Naofumi Ohnishi, A Coupling Simulation Integrating Molecular Dynamics and Particle-in-Cell Methods for Accurate Intense Laser-Target Simulations, *Phys. of Plasmas* (to be submitted on March)

著書

なし

国際学会

Harihara Sudhan Kumar, Masayuki Takahashi, Yasuhiro Kuramitsu, Takumi Minami, and Naofumi Ohnishi, A Coupling Simulation Integrating Molecular Dynamics and Particle-in-Cell Methods for Accurate Intense Laser-Target Simulations, 13th International Conference on High Energy Density Laboratory Astrophysics, Lisbon Portugal, May 2022.

国内学会・研究会等

なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

なし

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS04APR22
研究種別	特定研究
利用期間	$2022.04 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月28日提出

多様体論的アプローチによる能動的流体制御手法に関する

大規模数值解析

大西 直文 東北大学大学院工学研究科 教授 佐藤 慎太郎 東北大学大学院工学研究科 助教

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

乱流を伴う流れ場に対するリアルタイムフィードバック制御手法を確立することは、流体 機器の性能を飛躍的に向上させるだけでなく、流体力学の進歩という学術的な観点から見て も意義深いものである.ところが、理論的・演繹的手法のみでは、乱流を伴う流体機器周りの 流れ場を正確に推定することは現代においても難しく、従って、実験・数値流体力学を利用す ることが必要不可欠である.特に、近年の数値流体力学の発展により、乱流構造を伴う流れ を精緻に再現できるようになってきた.しかし、計算コストが膨大になるため、これらの知 見をリアルタイムフィードバック制御に活かすことは世界的に見ても未だに挑戦的な課題で ある.この課題に対して、本研究ではモード分解を利用した流れ場の低次元モデリングを用 いた革新的な流体制御手法の確立を目指す.これまでの研究は、特定の1つ数値計算結果に 対して得られる構造の議論に特化していたことに対し、本研究では多様体論的な観点を導入 することで、大域的な特徴抽出を可能にすることを目指す.

1.2 研究期間内の最終目標

これまでは、特定の1つの条件における数値計算結果もしくは実験結果に対してモード解 析を行い、低次元モデルを構築するのが一般的であったが、このように構築した低次元モデ ルでは条件の変化に対するロバスト性に乏しいことが大きな欠点であった。そこで、本研究 では、複数の条件に対しても適切な解を与える低次元モデルを提案することでこの課題を解 決する。そして、その構築した低次元空間上での流体制御則を構築し、リアルタイムフィード バック制御を可能にする流れ場の高速推定技術の確立およびそれに基づく制御則の提案が本 研究の最終目標である.

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
- 2.1 POD モードが Re 数方向に発展するシステムのモデリング

本年度は、円柱周り流れを対象として、幅広い条件下でも適切に流れ場を推定できる低次元 モデルを構築するために、固有直交分解 (Proper orthogonal decomposition: POD) によって 得られるモードが Re 数の変化に対してどのように変わるのかを調べ、それをモデリングする 手法について検討した.まず、ある Re 数における流れ場に対する POD を行うことで、複数 の POD モードが得られるが、これは多様体上のある点において接空間を与えることに対応し ており、Re 数が変化することで POD モードが変化することを、Re 数をパラメータとした曲 線に沿う接空間の変化として考える.さらに、この接空間の変化はある線形作用素によって記 述することができると仮定すると、POD モードの Re 数方向の発展を考えることができる。 線形作用素が与えられれば、POD モードが Re 数方向に発展する線形力学系として捉えるこ とができ、線形作用素の固有値および固有ベクトルを用いることで POD の Re 数変化をモ デリングする手法を提案した.提案手法を用いることで、60 < Re < 160 の範囲において円柱周 り流れを低次元の多様体上で適切に再現することができることを示した.

3. 研究目標の達成状況

本年度は、流体力学に対する低次元モデルのロバスト性の向上に向けたモデリングを提案し、 多様体論的なアプローチに基づいて新しい低次元モデルの基礎を構築した.本手法を用いる ことで、幅広い条件においても高速に流れ場を推定できる手法が構築できることが大いに期 待される.

4. まとめと今後の課題

円柱周り流れを対象として、幅広い条件下でも適切に流れ場を推定できる低次元モデルを構築するために、固有直交分解 (Proper orthogonal decomposition: POD) によって得られるモードが Re 数の変化に対してどのように変わるのかをモデリングする手法を提案し、提案手法を用いることで、60 < Re < 160 の範囲において円柱周り流れを低次元の多様体上で適切に再現することができることを示した.本年度は2次元的な流れ場に対する検証にとどまったため、次年度以降は乱流を伴う3次元的な流れ場においても提案手法が有効であることを実証することを目標とする.本手法を用いることで、幅広い条件においても高速に流れ場を推定できる手法が構築できることが大いに期待される.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい) 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

著書

国際学会

国内学会・研究会等

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01AUG22
研究種別	特定研究
利用期間	$2022.8 \sim 2023.3$
報告回数	第 1 回報告

2023年7月20日提出

大規模疎行列の通信隠蔽反復法の検討

水藤 寛, Huynh Q.H. Viet

東北大学材料科学高等研究所 教授, 助教

- 1. 研究の目的と目標
 - 1.1 研究の背景と目的

スーパーコンピューターの進歩に伴って幅広く研究されてきた大規模線形方程式の解法のひ とつとして、BiCGStab 法は広く知られたアルゴリズムである。近年、そのアルゴリズムの変 形として、Pipelined BiCGStab 法が提案された。これは、内積計算を行列ベクトル計算と オーバーラップさせることによって通信時間を最小化する方法で、並列計算機において標準 的に実装されている BiCGStab 法よりも計算速度が速く、注目されている方法である。一般 化された BiCGStab 法アルゴリズムとしては GPBiCG 法、BiCGSafe 法、BiCGStar-plus 法 など多数あるが、その中でも BiCGSafe 法は収束性の優れたアルゴリズムとされている。Viet Huynh 助教は、BiCGSafe 法の変形として通信オーバーヘッドが最小化された Pipelined BiCGSafe 法を提案した。この手法は計算速度、収束性、計算機資源の有効活用の3点にお いて、既存の手法を大きく改善するものになっている。これらの成果に基づく本研究は、ス ーパーコンピュータ上で大規模線形システムを解くための新しいアルゴリズムを開発するこ とを目的とした。

1.2 研究期間内の最終目標

研究期間内にスーパーコンピュータ上に Pipelined BiCGSafe 法を実装し、Pipelined BiCGStab 法と比較して収束性がどのように優れているかを明らかにし、その検証を実行することを目指した。

- 2. 研究成果の内容
 - 2.1 新しい解析手法の開発

内積計算と行列ベクトル計算を同時に計算できる Pipelined BiCGSafe 法(p-BICGSafe)を 実装した。図1に従来法との違いを示す。内積計算と行列ベクトル計算を1回だけ同時に計 算することが、提案手法の特徴であり、これにより他の方法よりも高いパフォーマンスを期

待できる。



図 1 Pipelined BiCGSafe (p-BiCGSafe) 法と従来方法の比較図

3. 研究目標の達成状況

提案した Pipelined BiCGSafe 法は、通常のコンピュータだけでなく、分散メモリ並列コンピ ュータにも実装可能であり、従来法 BiCGStab 法や Pipelined BiCGStab 法に比べて収束性 に優れていることを確認することができた。結果をまとめた論文を学術誌に投稿したところ、 主張を強化するために追加のテスト計算を提案され、その実行を通して性能の向上をさらに 明確に示すことが可能となった。

4. まとめと今後の課題

Pipelined BiCGSafe 法を提案・実装し、その収束性を従来法と比較して検証することができた。分散メモリ型並列コンピュータ上での従来法との間でパフォーマンスを比較することは、 今後の課題である。また、構造解析や流体解析における様々な問題を高速化するための応用研 究も今後の重要な課題である。

- 5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)
 - 5.1 学術論文・学会発表(発表予定含む)

学術雑誌(解説等を含む)

- Communication-hiding pipelined BiCGsafe methos for solving large linear systems, Applied Mathematics and Computation, Viet Q. H. Huynh, Hiroshi Suito, Vol. 449, 2023. https://doi.org/10.1016/j.amc.2023.127868..
- [2] Communication-hiding pipelined BiCGSafe methods for solving large linear systems, Viet Q. H. Huynh, Hiroshi Suito, https://arxiv.org/abs/2108.10591 (2021).

著書

該当なし

国際学会

該当なし

国内学会・研究会等

該当なし

5.2 その他(特許、受賞、マスコミ発表、等) 該当なし

書式(1)

プロジェクト研究成果報告書

課題番号	FS01OCT22
研究種別	特定研究
利用期間	$2022.10 \sim 2024.03$
報告回数	第 1 回報告

2023年2月28日提出

気象制御に向けた大規模自由度場の再現とアクチュエータ位置の最適化

アルゴリズムの研究

野々村 拓 東北大学大学院工学研究科 准教授 永井 大樹 東北大学流体科学研究所 教授

- 1. 研究の目的と目標(研究の背景と目的,具体的な目標を書いてください)
 - 1.1 研究の背景と目的

本研究は近年の激甚災害のリスク低減に向けて,気象制御のための大規模自由度場の観測と 制御を目標としたアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムの構築に取り組む.これまでに 大規模自由度場の観測と再現の手法はほぼ構築できており,今後は①制御対象である気象学 に基づいた大規模自由度場の再現,②気象制御のためのアクチュエータ位置の最適化アルゴ リズムの構築,を当面の研究対象としている.①は今なお再現が困難な線状降水帯等の災害 を,これまでに開発されてきた領域気象モデルを用いて再現する取り組みで,世界的にも今 まさに議論されている内容である.気象予測には現在アンサンブルカルマンフィルタ (EnKF)が広く用いられているが,②ではこれまでに開発してきた大規模自由度場の効率 的な観測のアルゴリズムの知見と EnKF を合わせて,世界に先駆けて激甚災害に関する気象 の制御を実現するアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムの研究に取り組む.

1.2 研究期間内の最終目標

まずはこれまでに開発された領域気象モデル(Weather Research and Forecasting(WRF), Scalable Computing for Advanced Library and Environment(SCALE)など)を用いた大規 模自由度場の再現に取り組み,解法による差異やその特徴について検討する.その後,得ら れた場に対して制御を実現するための最適なアクチュエータ位置の最適化アルゴリズムにつ いて検討する.

領域気象モデルを応用しての EnKF 等による予測の研究は世界的にも広く見られるが、本解 析のように制御を目的とした研究は類を見ない.非線形性・不確実性が大きな気象モデルに 対して適用性を検討する上で、より基礎的な問題に対して十分な制御を実現するアクチュエ ータ位置の最適化手法が確立されれば、広く適用性が見込める大きな成果となる. 国内外では異なる領域気象モデルを用いての様々な気象予測の研究が行われており、それら の適用性が議論されている.その中で本研究はそれぞれのモデルを横串として気象制御のア クチュエータ位置の最適化を研究する挑戦的な取り組みである.

- 2. 研究成果の内容(共同研究の場合はその意義について最初に記述してください)
 - 2.1 気象モデルに対するアクチュエータ位置最適化のための環境構築
 - プロジェクトが採択されてから現在までの約4か月間は気象モデルに対するアクチュエータ 位置最適化のための環境構築に充てた.調査によってWRFのデータ同化に関するパッケージ WRFDA において、気象モデルに対するアクチュエータ位置最適化に転用可能な随伴計算の ためのモジュールを発見した.このモジュールが機能することを確認するために、ローカル のワークステーションにおいてWRFDAを実行できる環境を構築し、WRFDAの4次元変分 法によって日本近辺の温度場のデータ同化を行い、別紙に示す図のように温度場が正常に修 正されることを確認した.現在は、スーパーコンピュータに対してもWRFDAを実行できる 環境を構築している.
 - 2.2 アクチュエータ位置最適化のためのアルゴリズムの開発と検証

開発するアルゴリズムの初期検証のために、アクチュエータ位置最適化のベンチマーク問題 においてよく用いられる線形化 Ginzburg-Landau(GL)方程式を MATLAB で実装した. さら に、特異ベクトルのピークにアクチュエータを配置するアルゴリズムを実装し、このアルゴ リズムが、インパルス応答の大きさの尺度では、比較的良い位置にアクチュエータを配置す ることを確認した.特異ベクトルは随伴計算を行うモジュールがあれば、気象モデルのよう な大規模なモデルに対しても計算可能である.現在は、制御理論から導かれる可制御性グラ ミアンに基づくアクチュエータ位置最適化アルゴリズムを開発中である.

3. 研究目標の達成状況

WRFのスーパーコンピュータへの実装ができておらず,気象モデルの解析が当初目標よりも遅れている.しかし,ローカルなワークステーションでは実装ができており,アクチュエータ位置最適化のために重要な随伴計算を行うモジュールを早期に特定できたことは大きな成果である.また,簡易モデルに対してはアクチュエータ位置最適化アルゴリズムの実装と検証ができており,アルゴリズムの基礎部分の開発は順調である.

4. まとめと今後の課題

本年度は、ローカルなワークステーションに対して WRF の 4 次元変分法を実行できる環境を 構築し、随伴計算を行うモジュールを特定した.また、線形化 GL 方程式に対して特異ベクト ル法に基づくアクチュエータ位置最適化アルゴリズムを実装した.スーパーコンピュータでの 気象モデルによる解析が当初目標よりも遅れており、スーパーコンピュータへの WRF のため の環境構築を加速する必要がある.環境構築後の当面の目標は、任意の場所にアクチュエータ を配置できるように WRF の気象モデルを改良することである.また、並行して気象モデルに 適用可能な可制御性グラミアンに基づく新たなアクチュエータ位置最適化アルゴリズムの開発 を行う.

5. 研究成果リスト(※第2回以降の報告の場合は、初回分から随時追記して下さい)なし.
Ⅱ. システム利用状況

本項では未来流体情報創造センターが運用する次世代融合研究システム「AFI-NITY」の利用状況を示す.本システムは2018年8月から運用を開始しており、その性能は以下のとおりである.

共有メモリ型並列	計算シ	ステムA	(FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4)
コア数	:	2080	コア
演算性能	:	159	TFLOPS
メモリ	:	33.1	ТВ
共有メモリ型並列	計算シ	ステム B	(FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4)
コア数	:	8320	コア
演算性能	:	638	TFLOPS
メモリ	:	33.1	ТВ
分散メモリ型並列	計算シ	ステム	(FUJITSU Server RIMERGY CX2550M4)
コア数	:	35200	コア
演算性能	:	2703	TFLOPS
メモリ	:	82.5	ТВ
<u>アプリケーション</u>	∕・リモ	ートグラ	フィックスサーバー (FUJITSU Server PRIMERGY RX2530M4
			及び PRIMERGY CX2570M4)
コア数	:	2080	コア
演算性能	:	159	TFLOPS
メモリ	:	33.1	ТВ
次世代融合インタ	ーフェ	ースサー	·バー (FUJITSU Server PRIMERGY CX2550M4)
コア数	:	288	コア
演算性能	:	27.6	TFLOPS
メモリ	:	1.5	ТВ
可視化サーバー	(FUJITSU	J Server Pl	RIMERGY RX2530M4 及び PRIMERGY CX2570M4)
コア数	:	720	コア
演算性能	:	55	TFLOPS
メモリ	:	11.4	ТВ
外部記憶装置			
一次領域	:	1.1	PB
二次領域	:	18	PB

CPU利用状況
次世代融合研究システム

集計対象期間:2022年4月~2023年3月

	4	散メモリ型並う	列計算システム		¥	有メモリ型並る	에計算システム	
	2022 / 04 - 2022	60 /	2022 / 10 - 2023	3 / 03	2022 / 04 - 2022	60 /	2022 / 10 - 2023	/ 03
	ノード時間[h]	専有率[%]	/	専有率[X]	ノード時間[h]	専有率[%]	ノード時間[h]	専有率[X]
電磁機能流動研究分野	553.2	%0:0	756.0	%0.0	0.0	0.0%	0.0	0.0%
融合計算医工学研究分野	0.0	%0.0	0.0	%0.0	0.0	0.0%	0.0	0.0%
生体流動ダイナミクス研究分野	8191.5	0.2%	8406.1	0.2%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
航空宇宙流体工学研究分野	219773.2	6.4%	365842.1	10.4%	7990.3	3.6%	2081.8	0.6%
宇宙熱流体システム研究分野	18674.0	0.5%	27734.2	0.8%	1.7	0.0%	0.0	0.0%
自然構造デザイン研究分野	78384.0	2.3%	1712.9	0.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
流動データ科学研究分野	126324.6	3.7%	203835.9	5.8%	1.1	%0:0	198.1	0.1%
高速反応流研究分野	21685.6	0.6%	25413.0	0.7%	55078.5	24.5%	39193.7	11.4%
伝熱制御研究分野	77357.8	2.2%	98563.0	2.8%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
先進流体機械システム研究分野	56882.5	1.7%	62124.6	1.8%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
複雑衝撃波研究分野	0.0	%0:0	0.0	%0.0	0.0	0.0%	0.0	0.0%
計算流体物理研究分野	596389.5	17.4%	686755.9	19.6%	68536.6	30.6%	201397.8	58.2%
非平衡分子気体流研究分野	60285.8	1.7%	85541.0	2.4%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
分子熱流動研究分野	272672.9	%6'L	443916.1	12.6%	0.0	0.0%	914.9	0.3%
量子ナノ流動システム研究分野	977675.7	28.4%	766236.2	21.9%	66709.1	29.8%	88525.6	25.6%
生体ナノ反応流研究分野	7431.4	0.2%	5794.1	0.2%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
分子複合系流動研究分野	518717.0	15.0%	381668.7	10.8%	15330.3	6.9%	1629.1	0.5%
先端車輌基盤技術研究(日立Astemo)Ⅲ	8788.7	0.3%	7726.0	0.2%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
グリーンナノテクノロジー研究分野	0.0	%0.0%	0.0	%0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
地殻環境エネルギー研究分野	0.0	%0'0	0.0	%0.0%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
エネルギー動態研究分野	359472.0	10.4%	309286.3	8.8%	2381.3	1.1%	9528.4	2.8%
システムエネルギー保全研究分野	0.0	%0.0%	0.0	%0.0	0.0	0.0%	0.0	0.0%
混相流動エネルギー研究分野	782.0	%0.0%	1699.1	0.1%	0.0	0.0%	0.0	0.0%
流動システム評価研究分野 ※~2023年9月	1356.1	%0'0	1	%0.0	6849.6	3.1%	0.0	0.0%
流動・材料システム評価研究分野 *2023年 - 10月~	1	0.0%	384.5	%0.0%	1	0.0%	1034.6	0.3%
マルチフィジックスデザイン研究分野	42681.6	1.2%	36479.4	1.0%	506.7	0.2%	0.0	0.0%
そのも	964.8	0.0%	1074.7	0.0%	356.8	0.2%	809.0	0.2%
合計	3455043.9	100.0%	3520949.8	100.0%	223742.0	100.0%	345313.0	100.0%
						201	18年8月 システム更新、サー	ビス提供開始

Ⅲ. 公表論文

学術雑誌(解説等を含む)

[SP01APR21]

焼野 藍子, 竜門賞受賞記念解説「壁乱流準秩序構造に着目した摩擦抵抗低減制御に	
関する研究」,日本流体力学会誌「ながれ」,41,161-166,2022. ・・・・・・・・・・	280
焼野 藍子,「流体工学におけるデジタルツイン」, 日本機会学会計算力学部門 CMD	
Newsletter, 68(November), 2022.	286
[SP02APR21]	
Timothy M. S. Jim, Ghifari A. Faza, Pramudita S. Palar, and Koji Shimoyama: A	
Multiobjective Surrogate-Assisted Optimisation and Exploration of Low-Boom	
Supersonic Transport Planforms, Aerospace Science and Technology, Vol. 128,	
Article 107747, September 2022. • • • • • • • • • • • • • • • • • •	291

[CP01APR22]

S. Miyauchi, K. Hosoi, S. Tsuda, T. Hayase, and K. Funamoto[:] Numerical Analysis of Hemodynamic Changes and Blood Stagnation in the Left Ventricle by Internal Structures and Torsional Motion, *AIPAdvances*, Vol. 13, Issue 4 (7 pages), 2023.... 312

[CP15APR22]

T. Saito, R. Takebayashi, M. Kubo, T. Tsukada, E. Shoji, G. Kikugawa, D. Surblys:	
Effect of surface modifier and solvent on the affinity between the surface-modified	
solid and organic solvent: A molecular dynamics study, <i>AIPAdvances</i> , Vol. 12, Issue	
10, 105206, 2022.	319

[CP17APR22] 江目宏樹:散乱性媒体によるふく射伝熱制御,伝熱, Vol. 62, pp. 8-13, 2023. ・・・・ 329

[CP18APR22]

[CP03JUN22]

T. Ijichi, H. Nagashima, A. R. Hartwekk, J. Ahn and T. Tokumasu: Oxygen Ion Condiction Property of Solid Oxide Menbrane Based on Multi-Scale Analysis, <i>ECS</i> <i>Transactions</i> , 111 (6) 1597-1602, 2023.	346
H. Nagashima, R. Falkenstein-Smith, J. Ahn and T. Tokumasu: Molecular dynamic study of oxygen ion diffusion and grain boundary in SrSc _{0.1} Co _{0.9} O _{3.6} perovskite solid oxide membrane, <i>Solid State Ionics,</i> 399, 116291, 2023.	352
[CL06APR22] M. Wang, Y. Yurikusa, Y. Sakai, K. Iwano, Y. Ito, Y. Zhou, Y. Hattori: Interscale transport of turbulent energy in grid-generated turbulence with low Reynolds numbers, <i>Int. J. Heat Fluid Flow</i> , Vol. 97, 109031, 2022.	362
[CL09APR22] Donatas Surblys, Florian Muller-Plathe, and Taku Ohara: Computing the Work of Solid-Liquid Adhesion in Systems with Damped Coulomb Interactions via Molecular Dynamics: Approaches and Insights, <i>Journal of Physical Chemistry A</i> , Vol. 126, pp. 5506-5516, 2022.	373
Haiyi Sun, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, and Taku Ohara: Molecular dynamics study on the role of hydrogen bonds and interfacial heat transfer between diverse silica surfaces and organic liquids, <i>International Journal of Heat and Mass Transfer</i> , Vol. 208, 124091, 2022.	384
[CL19APR22] Y. Yamaguchi, H. Kusudo, C. Bistafa, D. Surblys, T. Omori, G. Kikugawa: (Invited) Nanoscale Wetting and Its Connection with Macroscopic Young's Equation, <i>ECS</i> <i>Transactions</i> , Vol. 108, pp. 93-102, 2022.	396

[CL22APR22]

C.J.C. Otic and S. Yonemura: Thermally Induced Knudsen Forces for Contactless	
Manipulation of a Micro-Object, <i>Micromachines</i> , Vol. 13, 1092 (2022). • • • • • • •	406

[CL26APR22]

J. F. Torres, N. Ogasawara, T. Koizumi, Y. Kanda, A. Komiya: Low-energy activation of large convective heat transfer via flow resonance triggered by impinging jet, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 195, 123036, 2022.

[CL27APR22]

[CL28APR22]

A Kowata, S Kawasaki and Y Iga: Numerical analysis of the effect of slit shape on the performance and cavitation instability of liquid rocket inducer, *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, Vol. 1037, No. 012030, 2022. ••••• 450

[CL32APR22]

S. Takahashi, T. Nagata, Y. Mizuno, T. Nonomura, S. Obayashi: Effect of particle	
arrangement and density on aerodynamic interference between twin particles	
interacting with a plane shock wave, <i>Physics of Fluids</i> , Vol. 34, Issue 11, 113301,	
2022. ••••••••••••••••••••••••••••••••••	463

[CL33APR22]

[GR01APR21]

[GR05APR21]

N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, Y. Jin, S. Yasuhara, and T. Tokumasu: Reactive Force Field Molecular Dynamics Study of the Effects of Gaseous Species on the Composition and Crystallinity of Silicon–Germanium Thin Films, <i>Crystal Growth</i> & Design, American Chemical Society, Vol. 23, 4990-5000, 2023.	535
N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, Y. Jin, S. Yasuhara, and T. Tokumasu: Growth mechanism study of boron nitride atomic layer deposition by experiment and density functional theory, <i>Computational Materials Science</i> , Vol. 217, 111919, 2023.	546
N. Uene, T. Mabuchi, M. Zaitsu, S. Yasuhara, and T. Tokumasu: Reactive force- field molecular dynamics simulation for the surface reaction of SiHx (x =2-4) species on Si(100)-(2×1):H surfaces in chemical vapor deposition processes, <i>Computational Materials Science</i> , Vol. 204, 111193, 2022.	556
[GR03APR22] Keisuke Kanayama, Shintaro Takahashi, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta: Experimental and Modeling Study on Pyrolysis of Ethylene Carbonate/Dimethyl Carbonate Mixture, <i>Combustion and Flame</i> , Vol. 245, 112359, 2022.	563
[GR04APR22] A. Tsunoda, T. Akiba, H. Nakamura, Y. Morii, T. Tezuka, K. Maruta: Computational study on lean and rich combustion of flame ball, counterflow flame and planar flame: Their limits and stoichiometries, <i>Proceedings of the Combustion</i> <i>Institute</i> , Vol. 39, No. 2, 1937-1944, 2023.	570
[GR01JUN22] H. Suzuki, T. Mabuchi and T. Tokumasu: Molecular Dynamics Simulations of Cerium Ion Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Membranes of Polymer Electrolyte Fuel Cells, <i>ECS Transactions</i> , Vol. 109, pp. 295-302, 2022.	578
[YG01APR21] 阿部 圭晃,山崎 智基,伊達 周吾,竹内 稔,庄司 伊織,大林 茂,岡部 朋永:複 合材航空機主翼の静的空力弾性解析に向けた完全分離解法の提案,日本複合材料学会 誌,Vol.48,6,pp.246-257,2022. ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	586

[FS01APR21]

Takuji Ishikawa: Lubrication theory and boundary element hybrid method for	
calculating hydrodynamic forces between particles in near contact, $\ensuremath{\textit{Journal of}}$	
<i>Computational Physics</i> , Vol. 452, 110913, 2022. • • • • • • • • • • • • • • • • • •	598
Takuji Ishikawa, Thanh Nghi Dang, Eric Lauga: Instability of an active fluid jet,	
<i>Physical Review Fluids</i> , Vol. 7, 093102, 2022. •••••••••••••••••••••••••••••••••	616
[FS02APR22]	
Y. Kawagoe, K. Kawai, Y. Kumagai, K. Shirasu, G. Kikugawa, and T. Okabe:	
Multiscale modeling of process-induced residual deformation on carbon-fiber-	
reinforced plastic laminate from quantum calculation to laminate scale finite-	
element analysis, <i>Mechanics of Materials</i> , Vol. 170, 104332, 2022. •••••••	629
G. Yamamoto, K. Matsui, S. Yuki, and J.W. Suk: Determination of transverse	
isotropic elastic constants of nacre and constituent tablets based on genetic-	
algorithm- assisted resonant ultrasound spectroscopy, Results in Materials, Vol.	
15, 100312, 2022.	643
[FS01AUG22]	
Viet Q. H. Huynh, Hiroshi Suito: Communication-hiding pipelined BiCGsafe	
methos for solving large linear systems, Applied Mathematics and Computation,	
Vol. 449, 2023. ••••••••••••••••••••••••••••••••••••	650

国際/国内学会発表

[SP02APR21]

Muhammad Alfiyandy Hariansyah and Koji Shimoyama: Deep Learning	
Techniques for High-Dimensional Surrogate-based Aerodynamic Design, 33rd	
Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences (ICAS 2022),	
Stockholm, Sweden, 4-9 September 2022.	366

[CP01APR22]

[CP03APR22]

[CP05APR22]

D. Sasaki, K. Abe, H. Moriai, S. Takahashi, G. Yamada, S. Owgawa, K. Mori, S. Obayashi and K. Shimoyama: Study on Heat Flux Prediction Method for Cartesian-Mesh CFD Under Supersonic Flows, *Proceedings of the Twenty-second International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2022)*, Sendai, CRF-62, pp.135, 2022.

[CP31APR22]

R. Iura, T. Ukai, H. Yamashita, B. Kern, T. Misaka, S. Obayashi: Acoustic propagation analysis of sonic boom at atmospheric variation during 10-year flight, *Conference proceedings of inter-noise 2023*, 3-5-13, 2023. ••••••••• 695

[CP34APR22]

[CL02APR22]

T. Hara, H. Otsuka, H. Tokutake, and H. Nagai: Preliminary Study on Quadrotor	
Wake in Ground Effect Using Symmetry Walls, Proceedings of the Twenty-second	
International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2022), CRF-41,	
Sendai, Japan, 2022. •••••••••••••••••••••••••••••••••	711

[CL20APR22]

森井 雄飛,	Ajit K. Dubey, 中村 寿,	, 丸田 薫:単一火花点火装置を用いた定容器内	
におけるノ	ッキング実験の数値流体解	解析による再現, 第 33 回内燃機関シンポジウム,	
$2022 \cdot \cdot \cdot$	•••••	•••••••••••••••••••••••••••••••• 71	13

[CL30APR22]

S. Morizawa, R. Sakai, R. Kikuchi, and S. Obayashi: Development Study on an Air	
Transportation System with a Roadable Aircraft among Remote Islands, and Major	
Cities around Okinawa, Proceedings of the Twenty-second International	
Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2022), CFR-56, 2022. ••••••	717
森澤征一郎,新垣朝啓,菊地亮太,坂井玲太郎:台風が那覇空港の航空運航に与える 影響調査,第 60 回飛行機シンポジウム,1B04,2022. ・・・・・・・・・・・・・・・・・	719
[GR04APR22]	
K. Sagawa, Takaki Akiba, Akira Tsunoda, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Kaoru	
Maruta: Numerical Analysis of Flame Behavior Initiated from Flame Ball and Hot	
Spherical Zone in Counterflow Field, Nineteenth International Conference on Flow	
<i>Dynamics</i> , 2022. •••••••••••••••••••••••••••••••••	724

[GR05APR22]

Y. Hattori, I. Delbende, M. Rossi: Study of Turbulent Transition and Statistical
Properties of Turbulence of Destabilized Helical Vortex, Proceedings of the Twenty-
second International Symposium on Advanced Fluid Information (AFI-2022),
Sendai, Japan, 2022. ••••••••••••••••••••••••••••

[GR07APR22]

G. Tabe Jamaat, Y. Hattori: Searching for a Wall Model in LES using a Data-Driven	
Approach, Nineteenth International Conference on Flow Dynamics, 2022. •••••	728

[GR01JUN22]

H. Suzuki, T. Mabuchi and T. Tokumasu: Analysis of Cerium Ion Transport
Properties in PEM of Polymer Electrolyte Fuel Cells Using Molecular Dynamics
Simulations, *Proceedings for 27th European Fuel Cell Forum*, A1208, 2023. •••• 731

その他の成果

受賞

[SP02APR21]

焼野 藍子, 2022 年度日本機械学会流体工学部門フロンティア表彰, 2022 年 11 月 13 日.

Patrick Schittenhelm, The 19th International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022) Best Presentation Award, 2022 年 11 月 10 日.

小佐田 一, 日本航空宇宙学会北部支部 2022 年講演会並びに第3回再使用型宇宙輸送系シンポジウム Good Presentation Award, 2022 年4月 15日.

奥泉 寛之, 令和4年度科学技術分野の文部科学大臣表彰研究支援賞, 2022年4月15日.

[CP13APR22]

鈴木 杏奈, ナイスステップな研究者 2022 選定, 科学技術・学術政策研究所, 2022 年 12 月.

鈴木 杏奈, 東北大学ディスティングイッシュトリサーチャー称号付与, 2023年1月.

[CP15APR22]

斎藤 高雅,第 59回日本伝熱シンポジウム優秀プレゼンテーション賞,表面修飾無機固体 /ポリマー界面における分子構造と親和性の評価,日本伝熱学会,2022年5月19日.

竹林 遼,優秀学生賞,表面修飾 Al₂O₃/有機溶媒界面のナノスケール構造と親和性の相関の解明,化学工学会,2022 年 11 月 10 日.

Takamasa Saito, Best Poster Presentation Award, A Study on Nano-Scale Interfacial Phenomena between Surface-Modified Nanoparticle and Dispersed Media, Executive Committee of International Conference on Flow Dynamics, 2022 年 11 月 11 日.

[GR06APR22]

嶋崎 渉,第36回数値流体力学シンポジウム若手優秀講演表彰,アジョイント法による空 力騒音低減を目的とする形状最適化:形状表現の改良の効果,日本流体力学会,2023年1 月12日. [YG01APR21]

山崎 智基,第9回東北大学若手アンサンブルワークショップ優秀講演賞,航空機主翼の効率的な静的空力弾性解析を実現する完全分離解法,2022年11月22日.

特許

[SP01APR21] / [EF01SEP22]

Aiko Yakeno, Ultra-fine roughness effect on transition delay using direct numerical simulation, 米国特許仮出願 (63/389,369), 2022 年 7 月.

[GR01APR21]

令和4年,特許出願2022-083772.

マスコミ発表等

[SP02APR21]

"世界唯一の高性能ラティス型ヒートシンク構造を創出~積層造形・データ科学・電熱制御の融合による革新的設計~",東北大学流体科学研究所プレスリリース,2022年2月9日.

東北大学流体科学研究所 次世代融合研究システム利用研究成果報告書 第二十六巻 令和5年10月発行

編集・発行 東北大学流体科学研究所 未来流体情報創造センター センター長 丸田 薫

〒980-8577 仙台市青葉区片平2丁目1番1号 電話 022 (217) 5302番 (総務係・ダイヤルイン) FAX 022 (217) 5311番

製作:プリントコープ KOPAS